Berechnung der Photoionisation des Positroniums in Pulsarmagnetosphären und von Wasserstoffenergiewerten in Weißen-Zwerg-Magnetfeldern

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
FLORIAN GEYER
aus Heidenheim

1987

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543904_0081

Berechnung der Photoionisation des Positroniums in Pulsarmagnetosphären und von Wasserstoffenergiewerten in Weißen-Zwerg-Magnetfeldern

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Fakultät für Physik
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
FLORIAN GEYER
aus Heidenheim

1987

Tag der mündlichen Prüfung: 6. 3. 1987

Dekan: Prof. Dr. G. Wagner

1. Berichterstatter: Prof. Dr. H. Ruder

2. Berichterstatter: Prof. Dr. G. Wunner

Inhalt

Übersicht 1

1. Teil: Die Photoionisation des Positroniums 4

1. Einleitung 4

2. Das Positronium als 2-Körperproblem im homogenen Magnetfeld 5

2.1 Der verallgemeinerte Impuls 5

2.2 Der Hamiltonoperator für das 2-Körperproblem 7

2.3 Das Positronium 10

3. Die Photoionisation des Positroniums 13

3.1 Der Wechselwirkungsoperator 13

3.2 Beschreibung der Zustände 14

3.3 Das Matrixelement $M_{fi} = \langle f|H_W|i\rangle$ 15

3.4 Einige numerische Ergebnisse 20

4. Die Ionisationsrate des Positroniums 27

4.1 Die Lorentztransformation des Wirkungsquerschnitts 27

4.2 Berechnung der Ionisationsrate W durch thermische Mittelung 28

4.3 Einige numerische Auswertungen 31

2. Teil: Berechnung von Wasserstoffenergiewerten 45

1. Einleitung 45

2. Berechnung der Wellenfunktionen durch Entwicklung in der Landau-Basis 47

a.) Matrixdiagonalisierung 47

b.) Direkte Integration 51

3. Einige Ergebnisse 53

Literaturverzeichnis 78

Übersicht

Die Entdeckung riesiger Magnetfeldstärken bei Weißen Zwergsternen ($B \hat{=} 10^2$-10^4T) und Neutronensternen ($B \hat{=} 10^7$-10^9T) hat die Untersuchung der Materie in solchen Feldern stark gefördert. Solche enormen Feldstärken hat man für diese kompakten kosmischen Objekte - Endstadien der Sternentwicklung - schon lange theoretisch vorausgesagt. Sie entstehen beim Gravitationskollaps eines normalen Sternes ($R \hat{=} 10^6$km) zu einem Weißen Zwergstern ($R \hat{=} 10^4$km) oder zu einem Neutronenstern ($R \hat{=} 10$km). Dabei komprimiert sich das Magnetfeld zusammen mit der Materie und verstärkt sich so um den Faktor 10^4-10^{10}, wenn man näherungsweise die Erhaltung des magnetischen Flusses annimmt.

Der Nachweis der Felder und die Bestimmung ihrer Größe gründet sich bei Weißen Zwergen auf die Messung der Aufspaltung von Spektrallinien und der zirkularen Polarisation im optischen und extremen UV-Bereich (Angel et al 1981, Garstang 1982). Für Neutronensterne gelang Trümper et al (1978) der erste direkte Nachweis durch die Entdeckung einer verbreiterten Linie bei etwa 50keV im Spektrum der im Sternbild Herkules gelegenen pulsierenden Röntgenquelle Her X-1. Als einzige mögliche Erklärung für diese Linie verblieb der Zyklotronprozeß von Elektronen in einem heißen stark magnetisierten Plasma, wobei sich mit $\hbar\omega_B = 50$keV ein Magnetfeld von $B \hat{=} 5 \cdot 10^8$T ergab. Es handelt sich bei Her X-1 um einen Neutronenstern in einem Doppelsternsystem.

Um den Einfluß dieser Magnetfelder auf die Materie in atomaren Bereichen abschätzen zu können, vergleichen wir die Energie $\hbar\omega_B = \hbar eB/m_e$ der quantisierten Gyrationsbewegung eines Elektrons mit der für die Coulomb-Bindung typischen Rydberg-Energie $E_R = \alpha^2 m_e c^2/2 \hat{=} 13.6$eV. Wir bezeichenen dann solche Magnetfelder als extrem stark, für die

$$B > B_0 = 2(\alpha m_e c)^2/e\hbar \hat{=} 4.70 \cdot 10^5 \text{T}$$

ist. (B_0 ist so gewählt, daß $\hbar\omega_B$ gleich 4 mal der Rydberg-Energie ist.) Die Magnetfelder Weißer Zwerge sind

dann 10-100 mal kleiner als B_0. In diesem Bereich bricht selbst für niedrigliegende Zustände die störungstheoretische Behandlung zusammen. Die Magnetfelder von Neutronensternen liegen 2 bis 3 Zehnerpotenzen über B_0. Hier werden die Coulombkräfte von den Lorentzkräften bei weitem dominiert.

Es liegt auf der Hand, daß es notwendig wird, die physikalischen Eigenschaften der Materie in solchen Magnetfeldern neu zu berechnen. In der vorliegenden Arbeit soll das an 2 Beispielen geschehen, die in jüngster Zeit aktuell geworden sind.

Im 1.Teil soll die Photoionisation des Positroniums in Pulsarmagnetoshpären berechnet werden. Dieser Prozeß ist in Modellen des Emissionsmechanismus von Radiopulsaren von Bedeutung. Der Emissionsmechanismus wird wahrscheinlich von hochenergetischen Photonen getriggert, welche in der Polgegend in das starke Magnetfeld eindringen und dort Paarerzeugung machen. Die Elektron-Positron-Paare trennen sich aufgrund des durch Unipolarinduktion entstandenen starken elektrischen Feldes und werden entlang der gekrümmten Feldlinien des magnetischen Dipolfeldes beschleunigt. Die hochenergetische Krümmungsstrahlung der Elektronen und Positronen ist wiederum in der Lage Elektron-Positron-Paare zu erzeugen. Durch diesen Kaskadeneffekt entsteht ein starker Strom elektrisch geladener Teilchen an den Polkappen der Pulsare, der die Radiostrahlung verursachen soll.

Nun wurde aber von Shabad und Usov (1982) behauptet, daß die hochenergetischen Photonen vom starken Magnetfeld "eingefangen" werden, ohne Paarerzeugung zu machen, obwohl die Photonen aufgrund ihres Impulses senkrecht zum Magnetfeld, der bei $2m_ec$ liegt, dazu in der Lage wären. Es wurde aber von Herold et al (1985) gezeigt, daß diese "eingefangenen" Photonen in einen Bindungszustand des Positroniums transformiert werden. Aufgrund des Energie- und Impulssatzes kann dieses Positronium nicht mehr spontan

zerfallen. Es kann aber durch das starke elektrische Feld oder durch die thermische Strahlung von der Neutronensternoberfläche ionisiert werden. Geschieht die Ionisation noch in der Nähe der Sternoberfläche so kann der Kaskadeneffekt aufrecht erhalten werden.

Im 2. Teil werden Energiewerte des Wasserstoffatoms in Magnetfeldern der Größenordnung, wie sie auf Weißen Zwergen herrschen, berechnet. Da die Magnetfeldstärke wegen der Dipolstruktur dieser Sterne um etwa den Faktor 2 variiert, kommt vor allem den stationären Übergängen eine große Bedeutung zu. Mit Hilfe der genauen Kenntnis dieser Übergänge konnten bereits die Spektren Weißer Zwerge, wie des Grw 70°+8247 (Wunner et al 1985) interpretiert werden.

Das Hauptproblem bei der Bestimmung der Energiewerte und Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms in diesen Magnetfeldern ist, daß weder die Zylindersymmetrie des Magnetfeldes noch die sphärische Symmetrie des Coulombfeldes dominiert, und so keine Seperation der Variablen möglich ist. Deshalb müssen bei der Entwicklung nach für die Zylindersymmetrie charakteristischen Landaufunktionen viele Kanäle berücksichtigt werden, um eine genügende Genauigkeit der Energiewerte zu erreichen.

1. Teil

Die Photoionisation des Positroniums in Pulsarmagnetoshpären

1. Einleitung

Hier soll nun die Photoionisation des Positroniums in der Pulsarmagnetosphäre untersucht werden. Dazu muß das Positronium als Zweikörperproblem im Magnetfeld beschrieben werden. Man stößt dabei auf das Problem der Separierbarkeit des Schwerpunktes, welches erstmals von Avron (Avron et al 1978) unter mathemathischen Gesichtspunkten behandelt wurde. Die mehr physikalischen Aspekte des Zweikörperproplem wurden dann von Herold, Ruder und Wunner (Herold et al 1980) diskutiert.

Ausgehend von dieser Arbeit wird im 2. Kapitel kurz auf das Zweikörperproblem im homogenen Magnetfeld ohne Wechselwirkung und mit Coulombwechselwirkung eingegangen. Die Ergebnisse werden dann auf das Positronium angewandt. Im 3. Kapitel werden die Wirkungsquerschnitte der Photoionisation des Positroniums hergeleitet und einige numerische Auswertungen gezeigt. Im 4. Kapitel werden Ionisationsraten berechnet, die darüber Auskunft geben sollen, ob die freie Weglänge des Positroniums genügend klein ist, um in der Nähe der Neutronensternoberfläche in freie Elektronen und Positronen ionisiert zu werden. Hierzu muß der Wirkungsquerschnitt vom Ruhesystem des Positroniums in das Ruhesystem des Neutronensternes transformiert werden und anschließend über das von der Sternoberfläche herrührende thermische Strahlungsfeld gemittelt werden.

2. Das Positronium als 2-Körperproblem im homogenen Magnetfeld

2.1 Der verallgemeinerte Impuls $\vec{P}_0$

Die Erzeugende der infinitesimalen Translation $\delta\vec{r}$ ist der verallgemeinerte Impuls:

$$U = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\vec{P}_0 \cdot \delta\vec{r}\right] = 1 + \frac{i}{\hbar}\vec{P}_0 \cdot \delta\vec{r} \tag{1}$$

wobei U folgende Wikung hat:

$$U\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r} + \delta\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar}\vec{P}_0\delta\vec{r}\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}) + \delta\vec{r}\cdot\nabla\Psi(\vec{r}) \tag{2}$$

Daraus folgt für die Darstellung von $\vec{P}_0$:

$$\vec{P}_0 = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

Bei der Anwesenheit eines Vektorfeldes $\vec{A}(\vec{r})$ muß die Eichinvarianz gewährleistet sein:

$$\vec{A}(\vec{r},t) \to \vec{A}'(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{r},t) \tag{3a}$$

$$\phi(\vec{r},t) \to \phi'(\vec{r},t) - \partial_t\chi(\vec{r},t) \tag{3b}$$

wobei die Wellenfunktion eines geladenen Teilchens der Ladung q wie folgt transformiert werden muß:

$$\Psi(\vec{r},t) \to \Psi'(\vec{r},t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}q\chi(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t) \tag{3c}$$

In die infinitesimale Translation muß nun auch das Vektorfeld einbezogen werden:

$$\vec{A}'(\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \vec{A}(\vec{r}) + (\delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla})\vec{A}(\vec{r})$$

Wählt man nun speziell für χ:

$$\nabla\chi = -(\delta\vec{r}\vec{\nabla})\vec{A}(\vec{r})$$

so erhält man:

$$\chi = \chi_0 + \int^{\vec{r}} \vec{\nabla}\chi d\vec{r}' = \chi_0 - \int^{\vec{r}} (\delta\vec{r}\cdot\nabla)\vec{A}(\vec{r}')d\vec{r}' = \chi_0 - \sum_\mu \delta x_\mu \int^{\vec{r}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x'_\mu} d\vec{r}'$$

Damit erhält man für die Translation der Wellenfunktion eines geladenen Teilchens in einem Magnetfeld:

$$\Psi(\vec{r}) \to \Psi'(\vec{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} q\chi\right] \exp\left[\delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\right] \Psi(\vec{r})$$

(χ_0 weglassen)

$$\Psi'(\vec{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_\mu \delta x_\mu \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu} - q\int^{\vec{r}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x'_\mu} d\vec{r}'\right)\right] \Psi(\vec{r}) \equiv U\Psi(\vec{r})$$

wobei

$$U \equiv \exp\left[\frac{i}{\hbar}\delta\vec{r}\cdot\vec{P}_0\right]$$

mit

$$P_{0\mu} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu} - q\int^{\vec{r}} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x'_\mu} d\vec{r}' \tag{4}$$

dem verallgemeinerten Impuls in einem Magnetfeld.
Für N Teilchen entsprechend:

$$P_{0\mu} = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_{i\mu}} - q_i\int^{\vec{r}_i} \frac{\partial \vec{A}}{\partial x'_\mu} d\vec{r}'\right) \tag{4a}$$

Integriert man mit $\vec{B}$= rot$\vec{A}$ und läßt ein unwichtiges konstantes Feld weg, so erhält man:

$$\vec{P}_0 = \sum_{i=1}^{N}\left(\vec{p}_i - q_i\vec{A}(\vec{r}_i) + q_i\vec{B}\times\vec{r}_i\right) \tag{5}$$

und mit der Coulombeichung $\vec{A}=\frac{1}{2}\cdot\vec{B}\times\vec{r}$ folgt:

$$\vec{P}_0 = \sum_{i=1}^{N}\left(\vec{p}_i + \frac{1}{2}q_i\vec{B}\times\vec{r}_i\right) \tag{6}$$

Für $\vec{P}_0$ gelten folgende Vertauschungsrelationen:

$$[P_{0\mu}, P_{0\nu}] = -i\hbar\epsilon_{\mu\nu\lambda}B_\lambda\sum_i q_i \tag{7}$$

2.2 Der Hamiltonoperator für das 2-Körperproblem

Der Hamiltonoperator für das 2-Körperproblem lautet:

$$H = \frac{1}{2m_+}\left(\vec{p}_+ - e\vec{A}(\vec{r}_+)\right)^2 + \frac{1}{2m_-}\left(\vec{p}_- + e\vec{A}(\vec{r}_-)\right)^2 + V(\vec{r}_+, \vec{r}_-) \qquad (8)$$

wobei das positiv geladene Teilchen die Masse m_+ die Ladung $q=+e$ und den Ortsvektor $\vec{r}_+$, das negativ geladene Teilchen $m=m_-$, $q=-e$ und den Ortsvektor $\vec{r}_-$ hat. Umrechnen auf Schwerpunktsystem mit:

$$\vec{r} = \vec{r}_- - \vec{r}_+ \qquad M = m_+ + m_- \qquad \mu = \frac{m_+ m_-}{M}$$

$$\vec{r}_- = \vec{r}_s + \frac{m_+}{M}\cdot\vec{r} \qquad \vec{p}_- = \vec{p} + \frac{m_-}{M}\cdot\vec{p}_s \qquad \delta = \frac{m_+ - m_-}{M}$$

$$\vec{r}_+ = \vec{r}_s - \frac{m_-}{M}\cdot\vec{r} \qquad \vec{p}_+ = -\vec{p} + \frac{m_+}{M}\cdot\vec{p}_s$$

ergibt:

$$H = \frac{1}{2M}\vec{p}_s^2 + \frac{1}{2\mu}\vec{p}^2 + \frac{e}{2\mu}(\vec{B}\times\vec{r}_s)\vec{p} + \frac{e}{2M}(\vec{B}\times\vec{r})\vec{p}_s +$$

$$\frac{e\delta}{2\mu}(\vec{B}\times\vec{r})\vec{p} + \frac{e^2}{8\mu}(\vec{B}\times\vec{r}_s)^2 + \frac{e^2}{8}\frac{m_+^3 + m_-^3}{m_+ m_- M}(\vec{B}\times\vec{r})^2 + \qquad (9)$$

$$\frac{e^2\delta}{4\mu}(\vec{B}\times\vec{r}_s)(\vec{B}\times\vec{r}) + V(\vec{r})$$

Dieser Hamiltonoperator ist nicht mehr separierbar in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten.
Betrachten wir aber den verallgemeinerten Impuls in diesen Koordinaten:

$$\vec{P}_0 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{r}_s} - \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r} \qquad (10)$$

so vertauschen seine Komponenten wegen $\sum_i q_i = 0$ (vgl. Gl.7) und sie sind simultan meßbar. Wählt man als Eigenwerte für $\vec{P}_0$ $\hbar\vec{K}$, so führt dies über einen Ansatz der Wellenfunktion

$$\Psi(\vec{r}_s,\vec{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K} + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\Phi(\vec{r}) \qquad (11)$$

zu dem relativen Hamiltonoperator:

$$H_{rel} = \frac{1}{2M}\left(\hbar\vec{K} + e\vec{B}\times\vec{r}\right)^2 + \frac{1}{2\mu}\left(\vec{p} + \frac{m_+ - m_-}{2M}e\vec{B}\times\vec{r}\right)^2 + V(\vec{r}) \qquad (12)$$

der nun nicht mehr von $\vec{r}_s$ abhängt.

a.)Wechselwirkungsfreier Fall V(r)=0

Die Energieniveaus des Hamiltonoperators in Gl.(8) ohne Wechselwirkung sind die individuellen Landaunivaus der einzelnen Teilchen:

$$E(p_{z+}, n_{r+}, \bar{m}_+, p_{z-}, n_{r-}, \bar{m}_-) = \frac{p_{z+}^2}{2m_+} + \frac{p_{z-}^2}{2m_-} +$$

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_+(2n_{r+} + |\bar{m}_+| - \bar{m}_+ + 1) + \frac{1}{2}\hbar\omega_-(2n_{r-} + |\bar{m}_-| + \bar{m}_- + 1) \qquad (13)$$

$$= \frac{p_{z+}^2}{2m_+} + \frac{p_{z-}^2}{2m_-} + \hbar\omega_+(n_+ + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_-(n_- + \frac{1}{2})$$

$$\text{mit} \qquad \omega_+ = \frac{eB}{m_+} \quad , \quad \omega_- = \frac{eB}{m_-}$$

$$\text{und} \qquad n_+ = n_{r+} + \frac{1}{2}(|\bar{m}_+| - \bar{m}_+) \qquad n_- = n_{r-} + \frac{1}{2}(|\bar{m}_-| + \bar{m}_-)$$

Der relative Hamiltonoperator von Gl. (12) ausmultipliziert ergibt:

$$H_{rel} = \frac{\hbar\vec{K}^2}{2M} + \frac{e}{M}\hbar(\vec{K}\times\vec{B})\vec{r} + \frac{1}{2\mu}\vec{p}^2 + \frac{e}{2}\left(\frac{1}{m_-} - \frac{1}{m_+}\right)\vec{B}\cdot\vec{\ell} + \frac{e^2}{8\mu}(\vec{B}\times\vec{r})^2 \qquad (14)$$

mit ℓ dem Drehimpulsoperator. Für $\Phi(\vec{r})$ setzten wir an:

$$\Phi(\vec{r}) = \exp\left[i\frac{m_+ - m_-}{2M}\vec{K}_\perp\cdot\vec{r}\right]\Phi_0(\vec{r}') \qquad (15)$$

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_0 \quad , \quad \vec{r}_0 = -\frac{\hbar}{eB^2}\vec{K}\times\vec{B}$$

(mit $\vec{K}_\perp$ dem senkrechten Anteil von $\vec{K}$) und erhalten die

Eigenwertgleichung für $\Phi_0(\vec{r}')$:

$$\left[\frac{\hbar^2 K_z^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z'^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2}\right) + \frac{eB}{2}\left(\frac{1}{m_-} - \frac{1}{m_+}\right)\ell_z + \frac{eB^2}{8\mu}(x'^2 + y'^2)\right]\Phi_0(\vec{r}') = E\Phi_0(\vec{r}') \qquad (16)$$

mit den Eigenwerten:

$$E(K_{x'}, K_{y'}, K_{z'}, p_{z'}, n_r, \bar{m}) = \frac{\hbar^2 K_z^2}{2M} + \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\hbar\omega_+(2n_r + |\bar{m}| - \bar{m} + 1) + \frac{1}{2}\hbar\omega_-(2n_r + |\bar{m}| + \bar{m} + 1) \qquad (17)$$

ω_+, ω_- wie bei Gl. (13); n_r=0,1,2... Radialquantenzahl und $\bar{m}$ der Eigenwert von ℓ_z der z-Komponente des relativen Drehimpulsoperators.
Die Eigenfunktionen von dem x-y-Anteil des Hamiltonoperators (16) sind die Landaufunktionen $\phi_{n,m}(\vec{r}_\perp)$ mit $\bar{m}$ wie oben und $n = n_r + \frac{1}{2}\cdot(|\bar{m}| + \bar{m})$.

Für 3 Massenverhältnisse sind die Eigenwerte in Abhängigkeit von $\bar{m}$ und n in Bild 1 gezeichnet.

b.)2-Körperproblem mit Coulombwechselwirkung

Zu dem Hamiltonoperator in Gl. 14 kommt jetzt noch der Wechselwirkungs-Term (in Relativkoordinaten):

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

oder in verschobenen Koordinaten:

$$V(\vec{r}') = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}' + \vec{r}_0|}$$

(ab jetzt soll der Strich bei den verschobenen Koordinaten weggelassen werden) Da die Coulombwechselwirkung klein sein soll gegenüber der des Magnetfeldes, entwickelt man die Lösung nach Landaufunktionen:

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{n,\bar{m}} g_{n\bar{m}}(z)\phi_{n\bar{m}}(\vec{r}_\perp)$$

Da ℓ_z nicht mehr mit H vertauscht, also keine Erhaltungsgröße ist, muß auch über $\bar{m}$ summiert werden. In abiabatischer Näherung wird die Summation über n weggelassen:

$$\Phi_n(\vec{r}) = \sum_{\bar{m}} g_{n\bar{m}}(z)\phi_{n\bar{m}}(\vec{r}_\perp) \tag{18}$$

Setzt man $\Phi_n(\vec{r})$ anstelle von $\Phi_0(\vec{r})$ in (16) unter Berücksichtigung der Coulombwechselwirkung ein, multipliziert von links mit dem konjungiertkomplexen von $\phi_{n\bar{m}'}(\vec{r}_\perp)$ und integriert über die x,y bzw. ρ,ϕ-Koordinaten, so erhält man:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}g_{n\bar{m}}(z) + \sum_{\bar{m}'} V_{n\bar{m}',n\bar{m}}(z)g_{n\bar{m}'}(z) = E_{n\bar{m}}g_{n\bar{m}}(z) \tag{19}$$

mit

$$V_{n\bar{m}',n\bar{m}}(z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int \phi^*_{n\bar{m}'}(\vec{r}_\perp)\frac{1}{|\vec{r}+\vec{r}_0|}\phi_{n\bar{m}}(\vec{r}_\perp)dxdy \tag{20}$$

und den Energieeigenwerten $E_{n,\bar{m}}$. Gl. (19) ist ein System unendlich vieler gekoppelter Differentialgleichungen.

2.3 **Das Positronium**

Beim Positronium ist das Massenverhältniss $m_+/m_-=1$ und nach Bild 1 sind die Abstände der Energieniveau in den m-Quantenzahlen in der gleichen Grössenordnung, wie die in den n-Quantenzahlen. Das heißt, daß im Ansatz (18) auch die Summation über m weggelassen werden kann, und aus Gl.19 wird:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2}g_{n\bar{m}}(z) + V_{n\bar{m},n\bar{m}}(z)g_{n\bar{m}}(z) = E_{n\bar{m}}g_{n\bar{m}}(z) \tag{21}$$

Um diese Differentialgleichung zu lösen, muß noch das effektive Potential bestimmt werden:

$$V_{n\bar{m},n\bar{m}}(z) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\int \phi^*_{n\bar{m}}(\rho,\alpha)\frac{1}{|\vec{r}+\vec{r}_0|}\phi_{n\bar{m}}(\rho,\alpha)\rho d\rho d\alpha \qquad (22)$$

Daraus ergibt sich für $V_{n\bar{m},n\bar{m}}(z)$ (siehe Tworz Diplomarbeit 1984): ($\bar{m}$=n=0)

$$V_{00}^{K_\perp}(z) = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 a_L\sqrt{\pi}}\int_0^{\frac{\pi}{2}} \Re[cwerf(i|z| + \kappa\cos\vartheta)]d\vartheta \qquad (23)$$

mit $\kappa = \frac{1}{2}K_\perp a_L$

$$cwerf(z) = exp(-z^2)\cdot erfc(-iz)$$

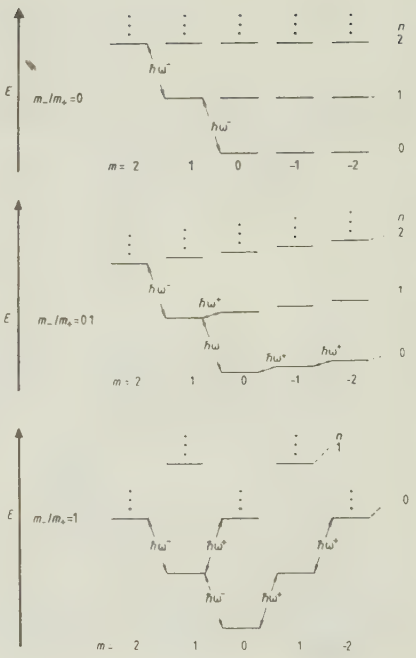
$$erfc(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^z exp(-t^2)dt$$

und $a_L = \sqrt{\frac{2\hbar}{eB}}$ dem Lamor'schen Radius

Mit Hilfe dieses Potentials kann die DGL (21) sowohl für die gebundenen Zustände (Tworz Diplomarbeit 1984) als auch für die ungebundenen Kontinuumszustände nummerisch gelöst werden.

Die für das Übergangsmatrixelement der Photoionisation benötigten Kontinuumszustände werden mit Hilfe eines Verfahrens nummerisch berechnet, das die hierzu notwendigen Randbedingungen berücksichtigt(siehe Schmidt Diplomarbeit 1980, Geyer Diplomarbeit 1983, Steitz Diplomarbeit 1984).

Bild 1: Energieniveauschema von 2 wechselwirkungsfreien geladenen Teilchen mit den Massen m_+ und m_- gezeichnet für die 3 Massenverhältnisse m_-/m_+ = 0 0.1 und 1.
Die Quantenzahl m ist der Eigenwert der z-Komponente des relativen Drehimpulses, n bezeichnet die Landauquantenzahl und $\hbar\omega^+$, $\hbar\omega^-$ sind die Zyklotronenergien.



3. Die Photoionisation des Positroniums

Den Wirkungsquerschnitt der Photoionisation erhält man aus:

$$\sigma = \frac{V}{c} w_{fi} \tag{24}$$

wobei

V = Normierungsvolumen der einfallenden Teilchen (Photonen)
c = Geschw. der einfallenden Teilchen (hier Lichtgeschw.)
w_{fi} = Überganswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit vom Anfangszustand |i> in den Endzustand |f>

ist.
w_{fi} erhält man aus der "goldenen Regel":

$$w_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |< f|H_W|i >|^2 \rho(E) \tag{25}$$

mit H_w dem Wechselwirkungsoperator und mit $\rho(E)$=Zustandsdichte pro Energieintervall der Endzustände, die hier eindimensional lautet:

$$\rho(E) = \frac{L_z}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\mu}{2E}} \tag{26}$$

μ = reduzierte Masse des Positroniums aus GL. (21)
L_z = Normierungslänge der eindimensionalen Endzustände

3.1 Der Wechselwirkungsoperator H_w

Der Hamiltonoperator des Positroniums in einem elektromagnetischen Feld lautet:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + \frac{\vec{p}_s^2}{2M} + \left[\vec{A}(\vec{r}_e) - \vec{A}(\vec{r}_p)\right] \frac{e}{M} \vec{p}_s + \left[\frac{\vec{A}(\vec{r}_e)}{m_e} + \frac{\vec{A}(\vec{r}_p)}{m_p}\right] e\vec{p} +$$

$$\frac{1}{2} e^2 \left[\frac{\vec{A}^2(\vec{r}_e)}{m_e} + \frac{\vec{A}^2(\vec{r}_p)}{m_p}\right] + \frac{e\hbar}{m_e} \vec{B} \cdot \vec{S}_e - \frac{e\hbar}{m_p} \vec{B} \cdot \vec{S}_p + V(\vec{r}_e, \vec{r}_p)$$

wobei S_e und S_p die Spinoperatoren von Elektron und Positron

sind. Damit kann auch die Wechselwirkung zwischen Spin und Magnetfeld berücksichtigt werden. (Index e steht für Elektron und Index p für Positron) Setzt man für $\vec{A}(\vec{r}_i)=\vec{A}_0(\vec{r}_i)+\vec{A}_{St}(\vec{r}_i)$ und $\vec{B}(\vec{r}_i)=\vec{B}_0(\vec{r}_i)+\vec{B}_{St}(\vec{r}_i)$, mit $\vec{A}_0$ bzw. $\vec{B}_0$ dem konstanten Magnetfeld und $\vec{A}_{St}$ bzw. $\vec{B}_{St}$ dem Strahlungsfeld, so erhält man für den Wechselwirkungsoperator H_w (weil hier nur Ein-Photonen-Prozesse betrachtet werden sollen, werden die quadratischen Glieder in $\vec{A}_{St}$ wegelassen):

$$H_w = \left[\vec{A}_{St}(\vec{r}_e) - \vec{A}_{St}(\vec{r}_p)\right]\frac{e}{M}\vec{p}_s + \left[\frac{\vec{A}_{St}(\vec{r}_e)}{m_e} + \frac{\vec{A}_{St}(\vec{r}_p)}{m_p}\right]e\vec{p}+$$

$$e^2\left[\frac{1}{m_e}\vec{A}_{St}(\vec{r}_e)\cdot\vec{A}_0(\vec{r}_e) + \frac{1}{m_p}\vec{A}_{St}(\vec{r}_p)\cdot\vec{A}_0(\vec{r}_p)\right] + \qquad (27)$$

$$\frac{e\hbar}{m_e}\vec{B}_{St}\cdot\vec{S}_e - \frac{e\hbar}{m_p}\vec{B}_{St}\cdot\vec{S}_p$$

mit dem Strahlungsfeld:

$$\vec{A}_{St}(\vec{r}_i) = \sum_{\vec{k}_{Ph}}\sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2V\omega_{Ph}}}\vec{\epsilon}_{Ph}\left[a_k\exp\left[i\vec{k}_{Ph}\vec{r}_i\right] + a_k^{\dagger}\exp\left[-i\vec{k}_{Ph}\vec{r}_i\right]\right] \qquad (28)$$

$$\vec{B}_{St}(\vec{r}_i) = i\sum_{\vec{k}_{Ph}}\sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2V\omega_{Ph}}}(\vec{k}_{Ph}\times\vec{\epsilon}_{Ph})\left[a_k\exp\left[i\vec{k}_{Ph}\vec{r}_i\right] - a_k^{\dagger}\exp\left[-i\vec{k}_{Ph}\vec{r}_i\right]\right]$$

$\vec{k}_{Ph}$ = Impulsoperator des Photons
$\vec{\epsilon}_{Ph}$ = reeller Polarisationsvektor des Photons

3.2 Die Zustände

Die Anfangs- und Endzustände setzen sich zusammen aus der Wellenfunktion für die Relativ- und Schwerpunktkoordinaten $\vec{r}$, $\vec{r}_s$, dem Photonenanteil und den Spinanteilen für das Elektron und das Positron. Für die Relativ- und Schwerpunktskoordinaten muß der Ansatz aus Gl. (11) übernommen werden.

3.2.1 **Beschreibung des Anfangszustandes |i>:**

Für den Anfangszustand wird der tiefste gebundene Zustand des Positroniums gewählt mit den Quantenzahlen n=m=0 für das Landauniveau und mit den Spineinstellungen antiparallel zum Magnetfeld für das Elektron und parallel zum Magnetfeld für das Positron. Der Photonenzustand wird durch $\vec{k}_{Ph}$ und $\vec{\epsilon}_{Ph}$ charakterisiert:

$$|i>= \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K}_i + \frac{1}{2}e(\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\Phi_i(\vec{r})|\vec{k}_{Ph},\vec{\epsilon}_{Ph}>|-\frac{1}{2}>_e|\frac{1}{2}>_p$$

$$\text{mit} \qquad \Phi_i(\vec{r}) = \phi_{00}(\rho,\alpha)g_{00}(z) \tag{29a}$$

3.2.2 **Beschreibung des Endzustandes |f>:**

$$|f>= \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K}_f + \frac{1}{2}e(\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\Phi_f(\vec{r})|0>_P h|\zeta>_e|\zeta>_p$$

$$\text{mit} \qquad \Phi_f(\vec{r}) = \phi_{n's'}(\rho,\alpha)f_{n's'}(z) \tag{29b}$$

Im Endzustand soll kein Photon mehr vorhanden sein, und der Spin des Elektrons bzw. Positrons $\zeta_{e,p}$ kann beliebig sein, d.h., es wird Spinflip zugelassen. Als weiteres sollen auch Anregungen in Landauniveaus mit den Quantenzahlen n und s möglich sein. g_{00} ist eine diskrete Lösung der eindimensionalen Schrödingergleichung (21), während $f_{n's'}$ eine an die Randbedingungen der Photoionisation angepasste Kontinuumslösung der Gl. (21) ist.

3.3 **Das Matrixelement M_{fi} = <f|H_w|i>**

a.) Ohne Spinflip für Elektron und Positron

Bildet man mit dem Wechselwirkungsoperator (27) und dem Anfangs- und Endzustand das Übergangsmatrixelement M_{fi}, führt das Skalarprodukt über den Photonenanteil und über die Spinanteile aus, so erhält man:

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2V\omega_{Ph}}} \int_{r_s}\int_{r} \exp\left[i\vec{k}_{Ph}\vec{r}_s\right] \Psi_f^*(\vec{r},\vec{r}_s)\Bigg[$$

$$2\cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}\right)\left(\frac{e}{m}\vec{\epsilon}_{Ph}\vec{p} - \frac{ie\hbar}{M}(\vec{k}_{Ph}\times\vec{\epsilon}_{Ph})_z + \frac{e^2}{M}\vec{\epsilon}_{Ph}(\vec{B}\times\vec{r}_s)\right) +$$

$$2i\sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}\right)\left(\frac{e}{M}\vec{\epsilon}_{Ph}\vec{p}_s + \frac{e^2}{2M}\vec{\epsilon}_{Ph}(\vec{B}\times\vec{r})\right)\Bigg]\Psi_i(\vec{r},\vec{r}_s)d^3r\cdot d^3r_s$$

wobei noch folgendes gesetzt wurde:

$$\Psi_{i,f}(\vec{r},\vec{r}_s) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K}_{i,f} + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\Phi_{i,f}(\vec{r})$$

$$\vec{A}_0(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r} \quad , \quad m_e = m_p = m \quad , \quad M = 2m$$

$$\vec{r}_e = \vec{r}_s + \frac{1}{2}\vec{r} \quad , \quad \vec{r}_p = \vec{r}_s - \frac{1}{2}\vec{r} \quad , \quad \mu = \frac{1}{2}m_e$$

Mit Hilfe von:

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \quad , \quad \vec{p}_s = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_s$$

$$\vec{\nabla}\Psi_i(\vec{r},\vec{r}_s) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K}_i + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\left(-\frac{ie}{2\hbar}(\vec{B}\times\vec{r}_s)\Phi_i(\vec{r}) + \vec{\nabla}\Phi_i(\vec{r})\right)$$

$$\vec{\nabla}_s\Psi_i(\vec{r},\vec{r}_s) = \frac{1}{\sqrt{V}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\hbar\vec{K}_i + \frac{1}{2}e\vec{B}\times\vec{r})\vec{r}_s\right]\frac{i}{\hbar}\Phi_i(\vec{r})\left(\frac{\hbar\vec{K}_i + e}{2\vec{B}\times\vec{r}}\right)$$

erhält man

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{\epsilon_0 2V\omega_{Ph}}}\int_{r_s}\int_{r}\frac{1}{V}\exp\left[i(\vec{k}_{Ph} - \vec{K}_f + \vec{K}_i)\vec{r}_s\right]\Phi_f^*(\vec{r})\frac{1}{2m}$$

$$\left[2i\sin\left(\frac{1}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}\right)\left(e\hbar\vec{\epsilon}_{Ph}\vec{K}_i + e^2\vec{\epsilon}_{Ph}(\vec{B}\times\vec{r})\right) - \right. \qquad (30)$$

$$\left. 2\cos\left(\frac{1}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}\right)\left(2e\frac{\hbar}{i}\vec{\epsilon}_{Ph}\vec{\nabla} - ie\hbar(\vec{k}_{Ph}\times\vec{\epsilon}_{Ph})_z\right)\right]\Phi_i(\vec{r})d^3r\cdot d^3r_s$$

Da $\vec{r}_s$ nur noch in der Exponentialfkt. zu Beginn des Ausdruckes auftaucht, kann über $\vec{r}_s$ integriert werden, und

man erhält ein

$$\delta_{\vec{K}_f,\vec{K}_i+\vec{K}_{Ph}} ,$$

das die Impulserhaltung beinhaltet.
Als weiteres wird angenommen, daß $\vec{K}_{Ph\perp}$ klein gegenüber $\vec{K}_{i\perp}$ ist. Man kann dann ungefähr $\vec{K}_{f\perp}=\vec{K}_{i\perp}=\vec{K}_{\perp}$ setzen und den Anfangs- und den Endzustand in den gleichen verschobenen Koordinaten nach Gl (15) schreiben.

Werden nun die Längen in Einheiten des Bohr'schen Radius a_B, die Wellenvektoren in $1/a_B$ geschrieben, für $\beta=(a_B/a_L)^2$ gesetzt, so erhält man für M_{fi} mit:

$$\Phi_i(\vec{r}) = \phi_{00}^{Lan}(\rho,\alpha)g_\nu(z) \qquad \text{und} \qquad \Phi_f(\vec{r}) = \phi_{n's'}^{Lan}(\rho,\alpha)f_{n's'}(z)$$

folgenden Ausdruck:

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B} \quad \left[i^{s'-n'}\exp\left[\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right]\left[\epsilon_z K_z I_{0n'}I_{0s'}F^+ - \right.\right.$$

$$2\epsilon_-\sqrt{\beta}I_{1n'}I_{0s'}F^+ + 2I_{0n'}I_{0s'}DF^+\epsilon_z - i(\vec{k}_{Ph}\times\vec{\epsilon}_{Ph})_z I_{0n'}I_{0s'}F^+\Big] -$$

$$i^{n'-s'}\exp\left[-\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right]\left[\epsilon_z K_z I_{0n'}I_{0s'}F^- - \right.$$

$$\left.\left. 2\epsilon_+\sqrt{\beta}I_{0n'}I_{1s'}F^- + 2I_{0n'}I_{0s'}DF^-\epsilon_z - i(\vec{k}_{Ph}\times\vec{\epsilon}_{Ph})_z I_{0n'}I_{0s'}F^-\right]\right] \qquad (31)$$

$$\text{wobei} \epsilon_\pm = \epsilon_x \pm i\epsilon_y$$

$$I_{ns}(x) = \frac{1}{\sqrt{n!s!}}\exp\left[\frac{x}{2}\right]x^{\frac{s-n}{2}}\frac{d^s}{dx^s}(x^n\exp[-x])$$

und das Argument der I_{ns} gleich $(K^2{}_{\perp Ph}/(16\beta))$ ist. Die $F^{\mp}$ und $DF^{\mp}$ sind definiert durch:

$$F^{\pm} = \int f^*(z)\exp\left[\pm\frac{i}{2}k_{Phz}z\right] g(z)dz$$

$$DF^{\pm} = \int f^*(z)\exp\left[\pm\frac{i}{2}k_{Phz}z\right] \partial_z g(z)dz$$

(Diese 4 Ausdrücke werden numerisch ausgewertet)
Folgende Abkürzung wird für M_{fi} definiert:

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B} \qquad \tilde{M}_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B}$$

$$\left[i^{s'-n'}\exp\left[\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right] A + i^{n'-s'}\exp\left[-\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right] B\right]$$

Der Winkel ϕ_k zwischen $\vec{K}_{Ph}$ und $\vec{r}_0$ ist ein weiterer Parameter, der im folgendem nicht mehr interessieren soll. Da ϕ_k nur noch in den Exponenten vor A und B auftauchen, und diese gleich

$$\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0 = \frac{i}{4\beta}k_{Ph\perp}k_{\perp}\cos\phi_k$$

sind, kann man leicht das über den Winkel ϕ_k gemittelte Betragsquadrat von M_{fi} angeben:

$$\hat{M} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |\tilde{M}_{fi}|^2 d\phi_k =$$

$$|A|^2 + |B|^2 - (-1)^{s'-n'}2\Re(A\cdot B^*)J_0(\frac{k_{Ph\perp}k_{\perp}}{2\beta}) \qquad (32)$$

wobei J_0 die 0. Besselfunktion ist.

b.) Nur Spinflip für das Elektron:
Beim Spinflipp für das Elektron erhält man für das Matrixelement M_{fi} nach Ausführen des Skalarproduktes über Photonen und Spinanteile:

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B} i^{s'-n'} \exp\left[\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right] I_{0n'} I_{0s'} F^+ i(\vec{k}_{Ph} \times \epsilon_{Ph})_-$$

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B}\tilde{M}_{fi}$$

Hierbei wurde auf die gleiche Weise wie oben integriert und die gleichen Bezeichnungen und Einheiten verwendet. Bildet man noch das Betragsquadrat und mittelt über ϕ_K wie oben, so erhält man:

$$\hat{M} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |\tilde{M}_{fi}|^2 d\phi_k = \left| I_{0n'} I_{0s'} F^+ (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_- \right|^2 \qquad (33)$$

c.) Nur Spinflip für Positron:
M erhält man auf die gleiche Weise zu:

$$\hat{M} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |\tilde{M}_{fi}|^2 d\phi_k = \left| I_{0n'} I_{0s'} F^- (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_+ \right|^2 \qquad (34)$$

d.) Spinflip für Elektron und Positron:
In diesem Fall erhält man für M_{fi}:

$$M_{fi} = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\epsilon_0\omega_{Ph}}}\frac{\mu_B}{a_B}\left[i^{s'-n'} \exp\left[\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right] I_{0n'} I_{0s'} F^+ i(\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_- - \right.$$

$$\left. i^{n'-s'} \exp\left[-\frac{i}{2}\vec{k}_{Ph}\vec{r}_0\right] I_{0n'} I_{0s'} F^- i(\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_+ \right]$$

und damit für $\hat{M}$:

$$\hat{M} = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} |\tilde{M}_{fi}|^2 d\phi_k = |I_{0n'} I_{0s'}|^2 \left[\qquad (35)\right.$$

$$\left| F^+ (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_- \right|^2 + \left| F^- (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_+ \right|^2 -$$

$$\left. (-1)^{n'-s'} 2\Re\left(F^+ (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_- \left(F^- (\vec{k}_{Ph} \times \vec{\epsilon}_{Ph})_+ \right)^* \right) J_0\left(\frac{k_{Ph\perp} k_\perp}{2\beta}\right) \right]$$

Zusammengefaßt erhält man für den Wirkungsquerschnitt:

$$\sigma = \frac{3\sigma_{Th}}{8\alpha^3\sqrt{\frac{E}{E_R}\frac{\hbar\omega}{E_R}}} \cdot \hat{M}$$

mit

$$\alpha = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{\hbar c} \qquad \text{(Feinstrukturkonstante)}$$

$$\sigma_{Th} = \frac{8\pi}{3}r_e^2 \qquad \text{(Thomsonquerschnitt)}$$

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \qquad \text{(klassischer Elektronenradius)}$$

$$E_R = \frac{\hbar}{2m_e a_B^2} \qquad \text{(Rydbergenergie)}$$

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar}{m_e e^2} \qquad \text{(Bohrscher Radius)}$$

wobei für $\hat{M}$ eine der Gleichungen (32)-(35) einzusetzen ist. Je nach Energie sind Landauanregungen oder Spinflips oder beides möglich, und der totale Wirkungsquerschnitt ist die Summe der Wirkungsquerschnitte der Ausgangskanäle.

Wählt man für $\vec{\varepsilon}_{Ph}$ die Basispolarisationsrichtungen $\vec{\varepsilon}_{\perp} = (0,1,0)$ und $\vec{\varepsilon}_{||} = (-\cos\theta,0,\sin\theta)$, mit θ gleich dem Winkel zwischen dem $\vec{B}$-Feld und $\vec{k}_{Ph} = (\sin\theta,0,\cos\theta)$, so erkennt man aus den Gl. 32-35, daß für den totalen WQ die Relation gilt:

$$\sigma_{tot}(\theta) = \sigma_{tot}(\pi - \theta) \qquad (36)$$

$$\sigma_{tot}(\theta) = \sigma_{tot}(-\theta)$$

3.4 Einige numerische Ergebnisse

In den Bildern 2-11 ist der WQ σ gegen die Photonenenergie für die Winkel θ = 90, 60, 30, 3 und 0 Grad aufgetragen. σ ist in Einheiten des Thomsonquerschnittes σ_{Th} und die Energie in Einheiten der Rydbergenergie E_R gezeichnet. Für das Magnetfeld ist β=1000 gewählt. Bei diesem Magnetfeld

ergibt sich für einen Impuls senkrecht zum Magnetfeld von $2m_ec$ ein $\kappa=4.333$. Die Polarisationsrichtung ist in den Bildern 2-6 $\vec{\varepsilon}_{||}$ und in den Bildern 7-11 $\vec{\varepsilon}_{\perp}$.

Zur Berechnung des WQ's, bei dem das Elektron oder das Positron in höhere Landauniveaus angeregt wird, wurde die Born'sche Näherung angewandt. D.h., für den Kontinuumszustand des Positroniums wurde eine ebene Welle in z-Richtung angesetzt. Die Born'sche Näherung stimmt mit der exakten Rechnung ab etwa $10E_R$ über der Landauschwelle (bei $E_{Ph}=n4\beta+EG$ $n=0,1,2,...,$ EG=Bindungsenergie des Grundzustandes)relativ genau überein.

Bei $\theta=90°$ besitzt der Wirkungsquerschnitt nach den Landauschwellen den größten Wert. Diese Spitzen sind etwa alle gleich hoch. Wird der Winkel θ kleiner, so wandern die Maxima von den Schwellen weg und werden nach jeder Schwelle kleiner. Bei $\theta=0°$ ist zwischen der 0. und der 1. Schwelle, sowie nach dem Abklingen des Maximas nach der 2. Schwelle der Wirkungsquerschnitt verschwunden. Bei der Polarisation $\vec{\varepsilon}_{||}$ ist kein WQ bis zur 1. Landauschwelle zu sehen. Seine Werte liegen hier unter 10^{-6}. Sonst ist es so ähnlich wie bei $\vec{\varepsilon}_{\perp}$. An einigen Schwellen erscheint eine Spitze. D.h. der WQ steigt steil an, fällt sofort wieder ab und steigt dann wieder an. Diese Spitze ist auf das Versagen der Born'schen Näherung zurückzuführen.

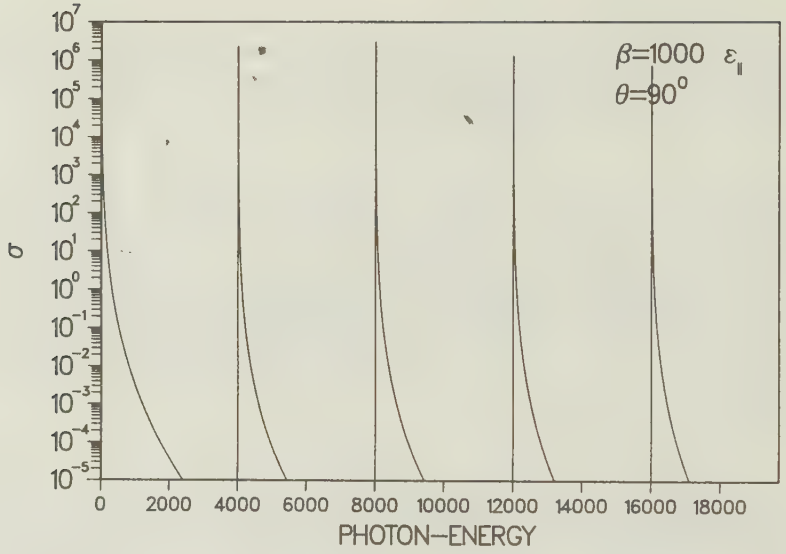


Bild 2

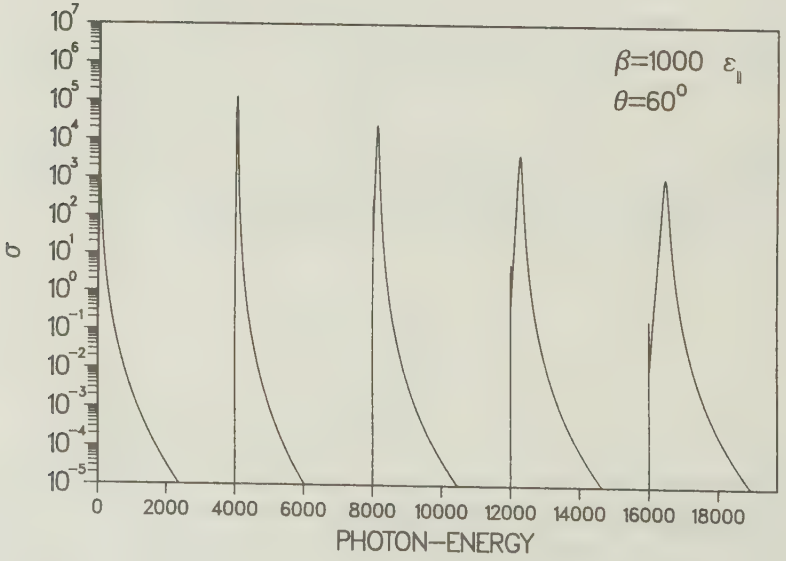


Bild 3

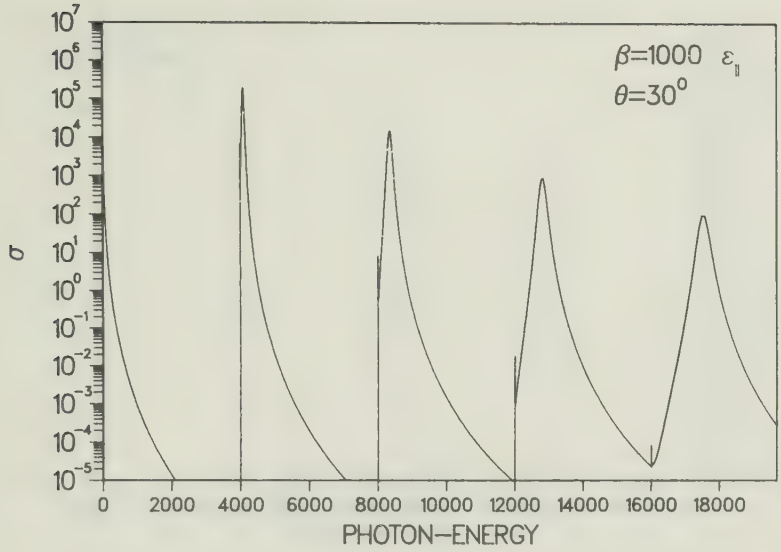

β=1000 ε∥
θ=30°
σ
PHOTON–ENERGY
0
2000
4000
6000
8000
10000
12000
14000
16000
18000

Bild 4

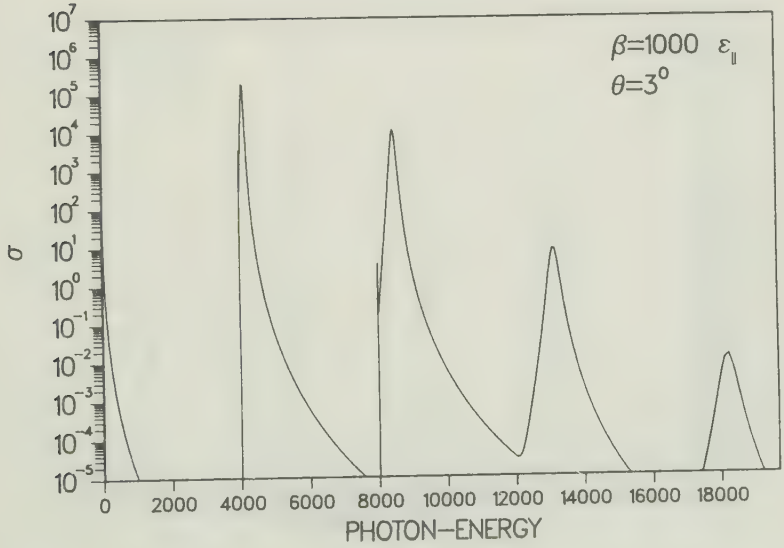

β=1000 ε∥
θ=3°
σ
PHOTON–ENERGY
0
2000
4000
6000
8000
10000
12000
14000
16000
18000

Bild 5

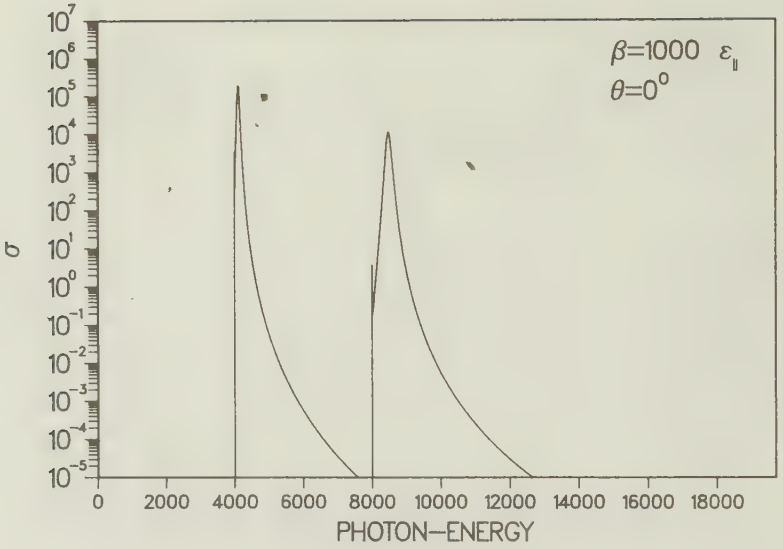


Bild 6

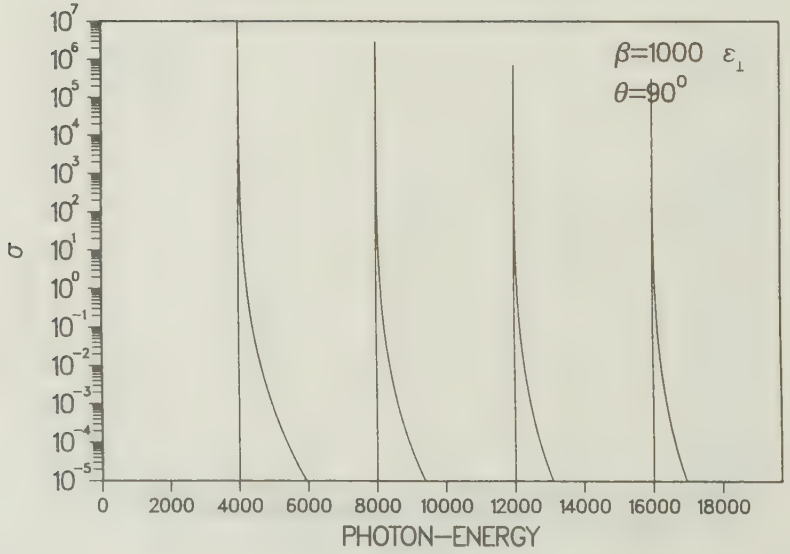


Bild 7

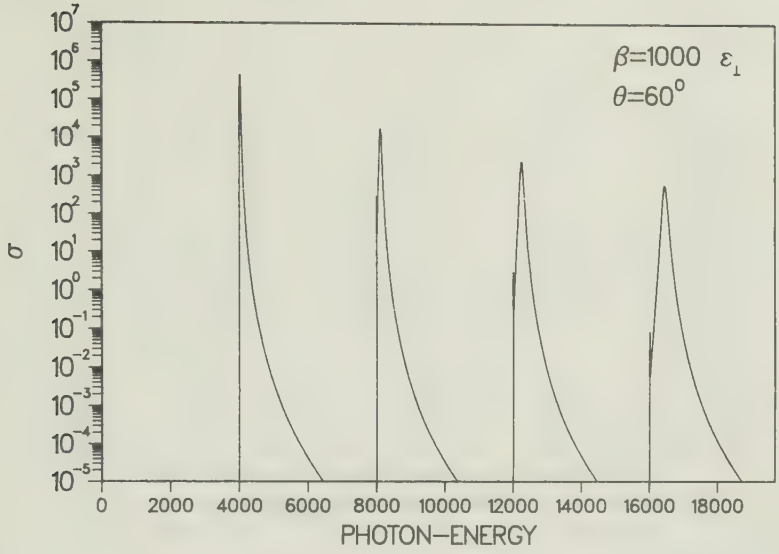

β=1000 ε⊥
θ=60°
σ
PHOTON–ENERGY
0 2000 4000 6000 8000 10000 12000 14000 16000 18000

Bild 8

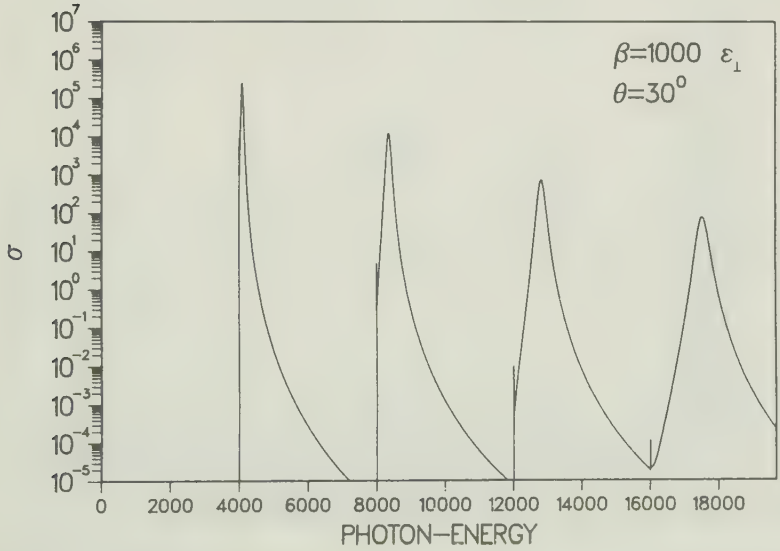

β=1000 ε⊥
θ=30°
σ
PHOTON–ENERGY
0 2000 4000 6000 8000 10000 12000 14000 16000 18000

Bild 9

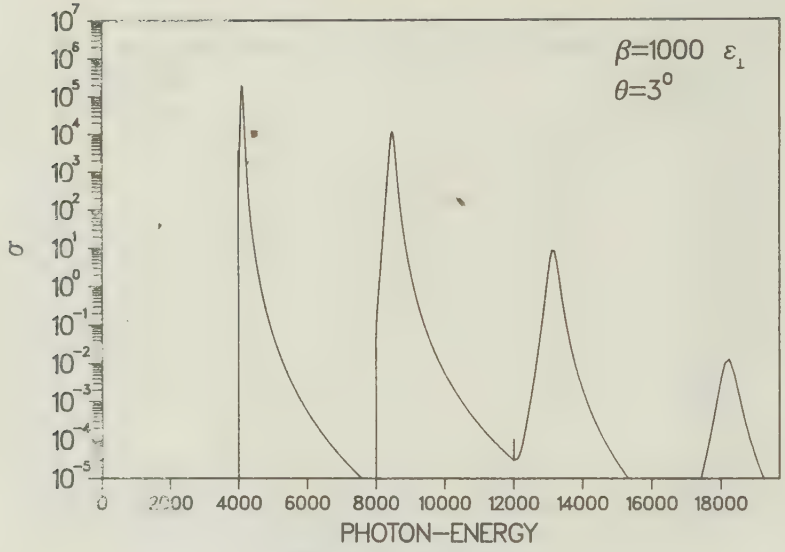


Bild 10

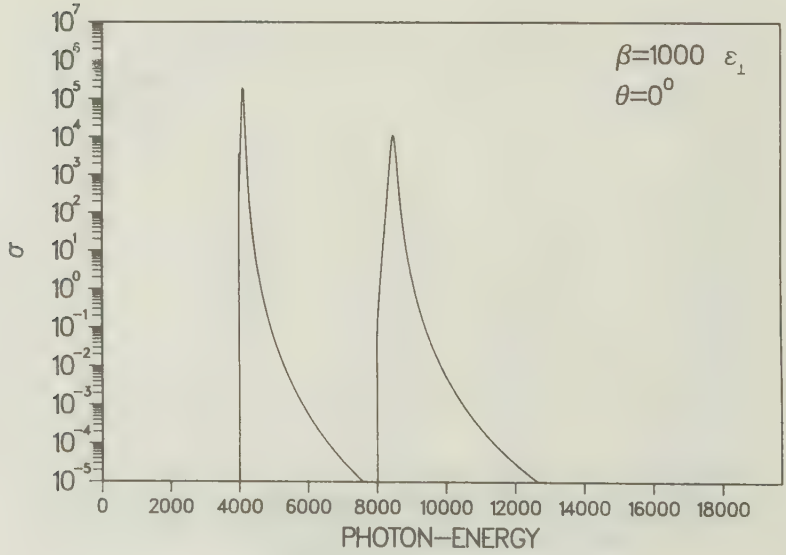


Bild 11

4. Die Ionisationsrate des Positroniums

4.1 Die Lorentztransformation des Wirkungsquerschnitts

Nun soll untersucht werden, wie sich der Wirkungsquerschnitt verhält, wenn sich das Positronium in einem Strahlungsfeld bewegt. Dazu wird als Ruhesystem (Index R) dasjenige bezeichnet, bei dem der verallgem. Schwerpunktsimpuls $\vec{K}$ nur noch eine Komponente $K_\perp$ senkrecht zum Magnetfeld aufweist, und $K_z=0$ ist. Als Laborsystem (Index L) wird dann das Ruhsystem des Neutronensternes bezeichnet, der das thermische Strahlungsfeld für die Ionisation liefert.

Die Transformation der Photonen vom Laborsystem ins Ruhsystem und des Wirkungsquerschnitts wieder zurück ins Laborsystem geschieht mit Hilfe der Lorentztransformation. Aufgrund der Bedingung $K_s=0$ genügt eine Transformation in z-Richtung mit der Transformationsmatrix:

$$M_T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & -\beta\gamma \\ 0 & 0 & -\beta\gamma & \gamma \end{pmatrix} \tag{37}$$

$$\text{mit} \qquad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \qquad \text{und} \qquad \beta = \frac{v}{c}$$

v ist die Geschwindigkeit des Ruhsystems gegenüber dem Laborsystem in z-Richtung.
Schreibt man den Viererwellenvektor eines Photons im Labor-, bzw. im Ruhsystem als:

$$k^i_{Ph\,L,R} = (\sin\theta_{L,R} \;\; , \;\; 0 \;\; , \cos\theta_{L,R} \;\; , \;\; c \;\;) \cdot |k_{Ph\,L,R}|$$

(mit $\theta_{L,R}$ dem Winkel zwischen Wellenvektor und Magnetfeld und $|k_{Ph\,L,R}|$ dem Betrag des 3-dimensionalen Wellenvektors), so erhält man aus der Transformationsgleichung:

$$k^i_{Ph\,R} = M_T \cdot k^i_{Ph\,L} \tag{38}$$

die Gleichungen:

$$k_{Ph\,R} = k_{Ph\,L}\gamma(1 - \beta\cos\theta_L) \tag{39}$$

$$\cos\theta_R = \frac{\cos\theta_L - \beta}{1 - \beta\cos\theta_L}$$

Ist der Wirkungsquerschnitt definiert als:

$$\sigma_{R,L} = \frac{\text{Zahl der Reaktionen } (n_T)}{(\Delta t)_{R,L} \cdot \text{Stromdichte } (j)_{R,L} \text{ der einf. Teilchen}}$$

$$= \frac{n_T}{(\Delta t)_{R,L} \cdot j_{R,L}} \tag{40}$$

so erhält man mit

$$j_R = j_L(1 - \beta\cos\theta_L)\gamma \quad \text{und} \quad (\Delta t)_L = (\Delta t)_R\gamma \tag{41}$$

als Zusammenhang zwischen dem Wirkungquerschnitt im Ruhsystem und im Laborsystem:

$$\sigma_L = \sigma_R(1 - \beta\cos\theta_L) \tag{42}$$

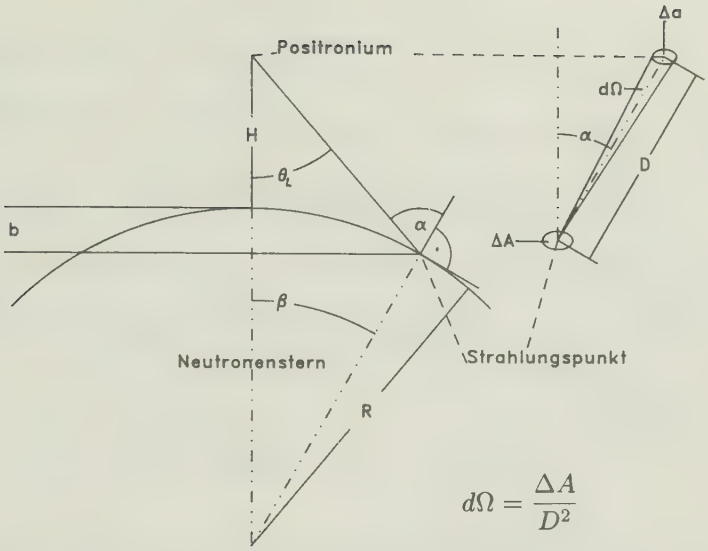
4.2 Berechnung der Ionisationsrate W durch thermische Mittelung

Hier soll nun die Ionisationsrate des Positroniums berechnet werden, das sich in einem thermischen Strahlungsfeld befindet, welches von der Oberfläche eines Neutronensternes bei der Temperatur T erzeugt wird. Das Positronium bewege sich dabei mit dem verallg. Impuls $K_\perp$ senkrecht zum Magnetfeld. Es sind dann die Transformationen von 4.1 anwendbar.

Das Magnetfeld ist auf der Polkappe näherunsweise radial. Die augenblickliche Höhe des Positroniums über dem Neutronenstern betrage H und der Radius des Sterne sei R. Die Plancksche Strahlungsformel für eine Oberfläche lautet:

$$I = \frac{\text{Anzahl d. Photonen } (n)}{\text{Zeit } (\Delta t) \cdot \text{Fläche } (\Delta A) \cdot d\Omega \cdot d\nu} = \frac{\nu^2}{c^2} \frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{kT}\right] - 1} \tag{43}$$

für eine Polarisationsrichtung.



$$d\Omega = \frac{\Delta A}{D^2}$$

Für die Photonenstromdichte erhält man mit ΔA → dA:

$$j = \frac{\text{Anzahl d. Photonen } (n)}{\text{Zeit } (\Delta t) \cdot \text{Fläche } (dA)} = I\frac{dA}{D^2}d\nu$$

Unter Beachtung des Lambert'schen Gesetzes muß noch der Faktor cos(α) hinzugefügt werden:

$$j = I\frac{\cos\alpha \cdot dA}{D^2}d\nu \qquad (44)$$

dA ist ein Oberflächenelement des Neutronensternes:

$$dA = R \cdot db \cdot d\phi$$

Da der Wirkungsquerschnitt in diesem Fall unabhängig von ϕ ist, kann über ϕ gleich integriert werden, und man erhält ein Kreisringoberflächenelement:

$$dA = 2\pi R \cdot db$$

Aus der Skizze erkennt man die Winkelrelation $\alpha=\beta+\theta_L$. Mit den Beziehungen

$$\sin\alpha = \sin(\beta + \theta_L) = \frac{R+H}{R}$$

$$\cos\beta = \frac{R-b}{R}$$

Daraus erhält man den Zusammenhang zwischen b und θ_L:

$$b = R - R\cos\left[\arcsin\left(\frac{R+H}{R}\sin\theta_L\right) - \theta_L\right] \tag{45}$$

und damit auch die Ableitung $db/d\theta_L$. Für D^2 ergibt sich:

$$D^2 = 2R^2 + 2RH + H^2 - 2R(R+H)\cos\left[\arcsin\left(\frac{R+H}{R}\sin\theta_L\right) - \theta_L\right] \tag{46}$$

Mit der Abkürzung:

$$\frac{\cos\alpha \cdot dA}{D^2} = F(\theta_L, R, H)d\theta_L$$

erhält man für die Ionisationsrate:

$$W(T,R,H) = \int_{\nu=0}^{\infty}\int_{0}^{\theta_{L,max}} \sigma_L(\nu,\theta_L)F(\theta,R,H)\frac{\nu^2}{c^2}\frac{1}{\exp\left[\frac{h\nu}{kT}\right]-1}d\theta_L d\nu \tag{47}$$

wobei $\theta_{L,max}$ gegeben ist durch:

$$\sin\theta_{L,max} = \frac{R}{R+H}$$

Die Ionisationsrate erhält man also auf folgende Weise: Als erstes wählt man einen Winkel θ_L (zw. k_{Ph} und dem B-Feld) und eine Photonenenergie E_L im Ruhesystem des Neutronensternes. Dieses transformiert man mit Hilfe der Gl. 39 in das Ruhesystem des Positroniums und berechnet dort den WQ. Nach Zurücktransformation des WQ's in das Ruhesystem des Neutronensternes wird über den Winkel θ_L und der Energie E_L nach Gl. 47 integriert.

4.3 Einige numerische Auswertungen

4.3.1 Diskussion der Ergebnisse

Da das Positronium aus einem hochenergetischen Photon im Magnetfeld entstanden ist, muß der Impuls senkrecht zum Magnetfeld $2m_e c$ betragen. Daher ergibt sich aus der Definition von κ bei Gl. (23) für die verschiedene Magnetfeldstärken die hier relevanten κ-Werte: bei β=1000 κ=4.333, bei β=2000 κ=3.064 und bei β=500 κ=6.128. Die 3 γ-Werte als Parameter aus der Lorentztransformation 100, 1000, 10000 entsprechen einer Anfangsenergie von etwa 100MeV, 1000MeV und 10000MeV des Photons, aus dem das Positronium entstanden ist.

In den Bildern 12-20 ist als Zwischenergebnis der mit

$$\sigma' = \int_0^{\theta_{L,max}} \sigma_L(\nu, \theta_L) F(\theta_L, R, H) d\theta_L \qquad (48)$$

integrierte Wirkungsquerschnitt aufgetragen. Man erkennt in den Bildern mit senkrechter Polarisation am 1. Maximum jeder Kurve, daß aufgrund der Lorentztransformation schon eine geringere Photonenenergie als die Bindungsenergie ausreicht, um zu ionisieren. Bei steigendem γ wandert dieses Maximum zu immer kleinerer Energie. Auch der steile Anstieg danach zum 2. Maximum, welches durch das 1. Landauniveau erzeugt wird, ist bei wesentlich geringerer Energie als die Landauschwelle bei den Bildern 2-11. Das 3. Maximum, als Ergebnis der 2. Schwelle, ist kaum mehr zu erkennen und zeigt, daß die weitern Schwellen kaum mehr eine Rolle spielen. Bei größerem γ wird das 1. Maximum kleiner, während die Übrigen in etwa alle gleich groß bleiben.

Vergleicht man die Bilder 12-15, in denen bei β=1000 die Höhe des Positroniums über dem Neutronenstern variiert wird, so sieht man, daß bei kleineren Höhen die Maxima zu kleineren Energien wandern und etwas höher werden.

Im Bild 16 ist im Gegensatz zu den Bildern 12-15 die senkrechte Polarisation gewählt. Es fällt auf, daß bei dieser Poarisation der Anteil der von der nullten Schwelle herrührt, ganz fehlt, wie man schon in den Bildern 2-11 sehen konnte.

Bei Variation des Magnetfeldes erkennt man, daß das Maxima, das von der nullten Schwelle erzeugt wird, in etwa gleich groß bleibt, während die folgenden bei wachsendem β immer kleiner werden. Dies sieht man an den Bildern 17 und 18 mit β=2000 und den Bildern 19 und 20 mit β=500.

In den Bildern 21-29 ist die Ionisationsrate W in 1/sec. als Funktion der Temperatur aufgetragen, wie man sie nach Gl. (47) erhält.

Die 3 Kurven sind wieder die Ergebnisse für die 3 γ-Werte. Das Verhalten der Kurven bei senkrechter Poalrisation erkennt man am deutlichsten bei γ=100: nach einem anfänglich linearen Anstieg wird dieser plötzlich steiler, um sich am Ende wieder abzuflachen. Dieser Knick in der Kurve wird von dem Anteil verursacht, der von der 1. Landauschwelle herrührt. Für die anderen γ-Werte laufen die Kurven genauso, nur das der Knick bei größeren γ-Werten zu kleineren Temperaturen hin verschoben ist und die gesamte Kurve niedriger liegt. Bei paralleler Polarisation fehlt der lineare Anstieg am Anfang.

In den Bildern 21-24 ist die Höhe variiert. Die Ionisationsrate wird bei steigender Höhe etwas kleiner.

Ein Vergleich bei β=2000 (Bilder 26 und 27) mit β=500 (Bilder 28 und 29) zeigt, daß bei steigendem β die Ionisationsrate abnimmt.

4.3.2 Zusammenfassung

Betrachtet man einen Neutronenstern mit einem Magnetfeld der Stärke β=1000 und einer Temperatur von etwa 10^6K, so erhält man bei γ-Werten zwischen 100-10000 und einer Höhe des Positroniums über der Neutronensternoberfläche von 0.01km Ionisationsraten von etwa $10^6$1/s bis $10^9$1/s. Das

Inverse der Ionisationsrate ist die Lebensdauer des Positroniums. Da die Geschwindigkeit des Positroniums bei diesen γ-Werten fast die Lichtgeschwindigkeit von etwa c=300000km/s ist, beträgt also der mittlere Weg ,den das Positronium bis zu seinem Zerfall zurücklegt etwa 0.3-300m. Dies würde ausreichen, um das Positronium noch innerhalb der Magnetosphäre zu ionisieren und die für den Pulsarmechanismus notwendigen freien Elekronen und Positronen zu liefern.

4.3.3 Zu den Bildern

In den Bildern 12-20 ist der über den Winkel θ_L nach der Gl.(48) integrierte Wirkungsquerschnitt aufgetragen. Die 3 Kurven pro Bild sind die Ergebnisse der Rechnungen für die Parameter γ=100, 1000, 10000 der Lorentztransformation. Für den Neutronenstern wurde ein Radius von R=10km gewählt. Das Magnetfeld beträgt β=1000, 2000, und 500. $\varepsilon_{||}$ ist die parallele und $\varepsilon_{\perp}$ die senkrechte Polarisation des Photons und H die Höhe des Positroniums über der Sternoberfläche. Die Photonenenergie ist in Einheiten der Rydbergenergie E_R aufgetragen.

In den Bildern 21-29 ist die Ionisationsrate aufgetragen, die man nach Gl.(47) erhält. Die 3 Kurven beziehen sich wieder auf die γ-Werte von 100, 1000 und 10000 der Lorentztransformation.

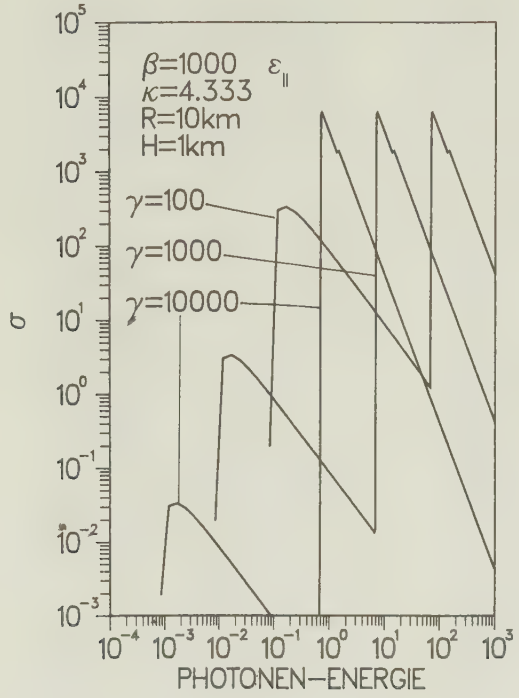


Bild 12

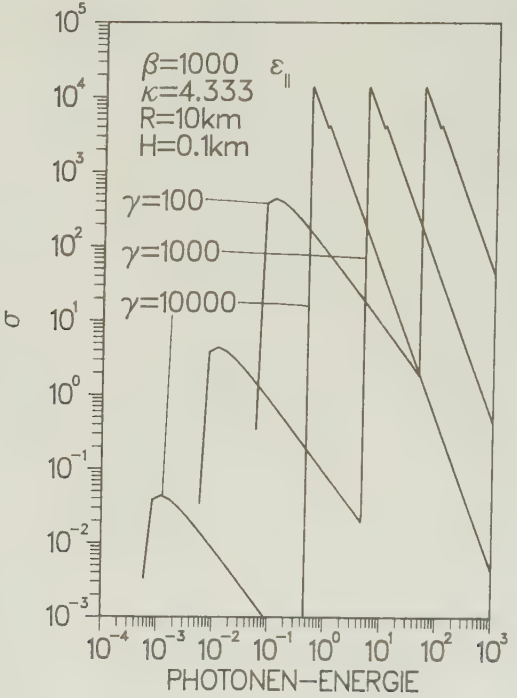


Bild 13

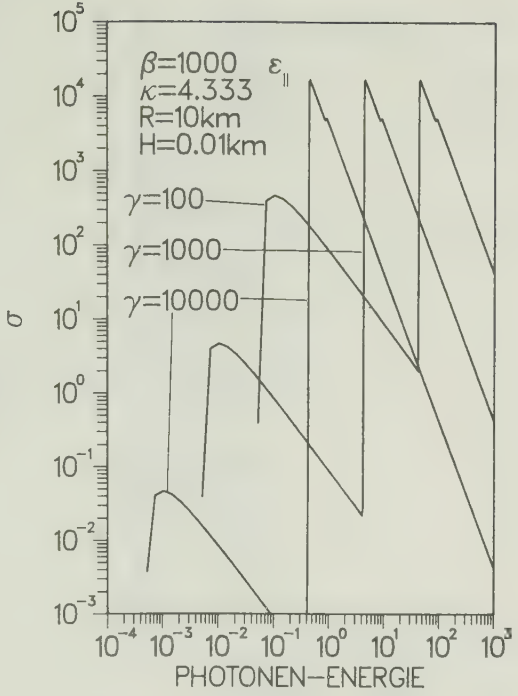


Bild 14

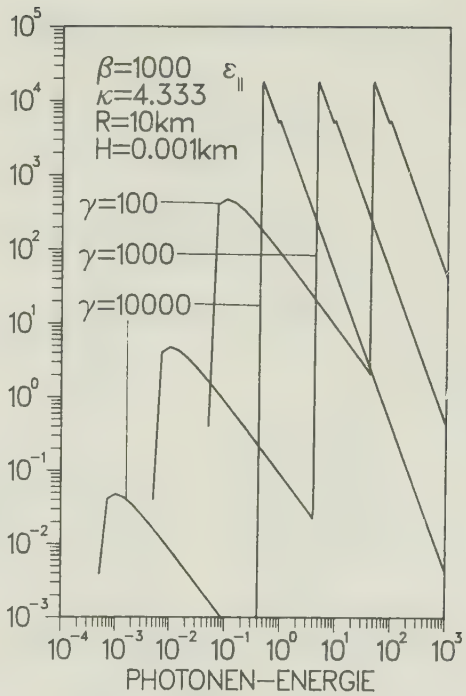


Bild 15

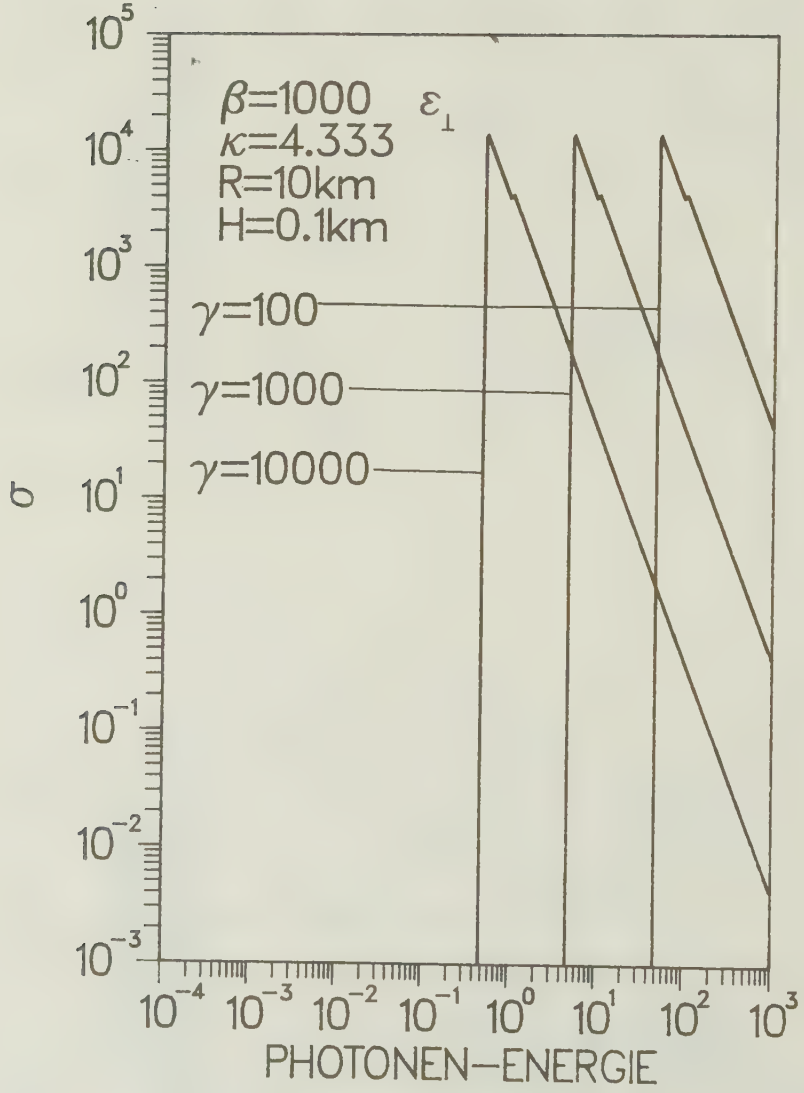

β=1000
κ=4.333
R=10km
H=0.1km
ε⊥
γ=100
γ=1000
γ=10000
σ
PHOTONEN–ENERGIE

Bild 16

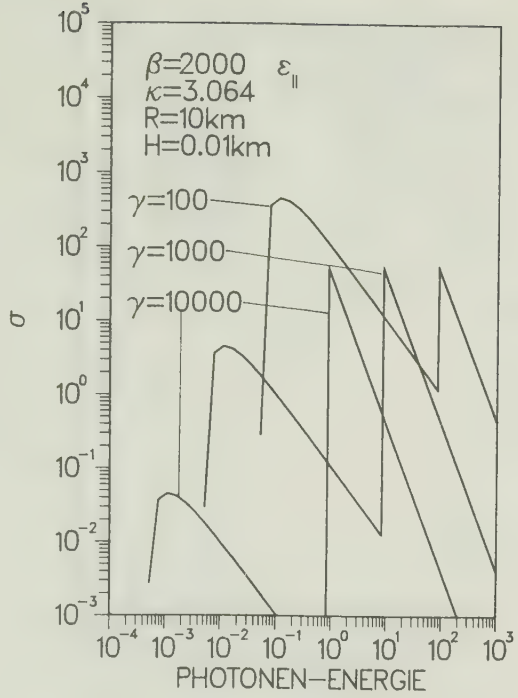


Bild 17

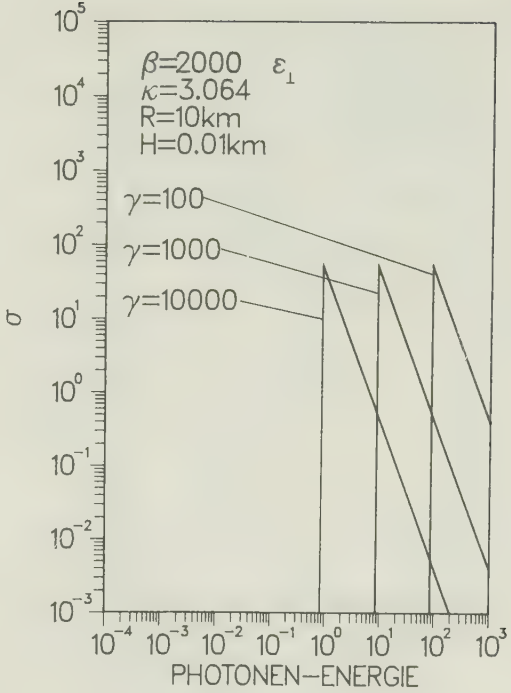


Bild 18

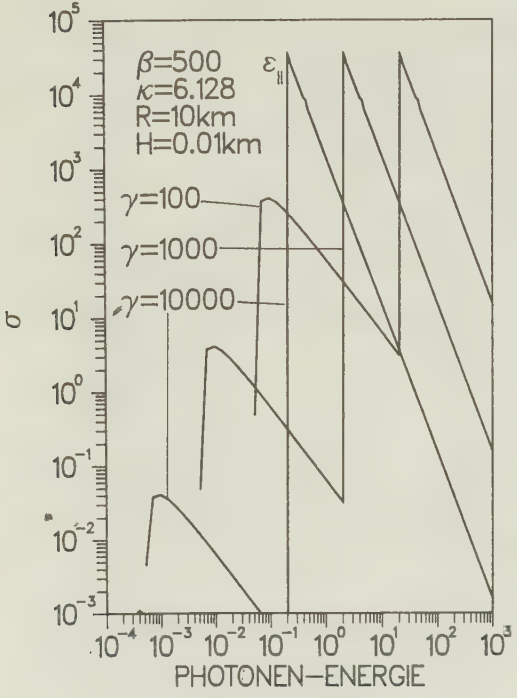


Bild 19

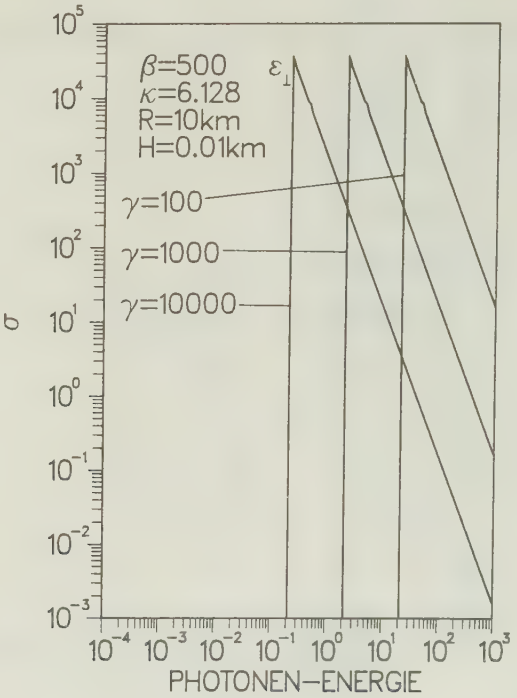


Bild 20

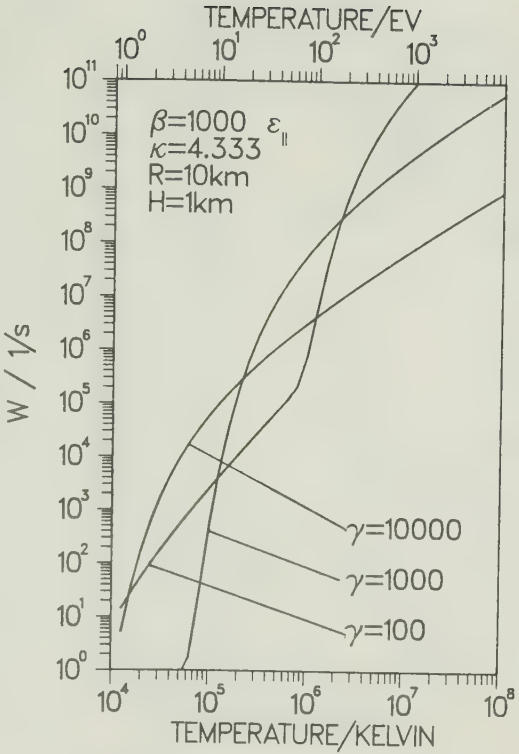


Bild 21

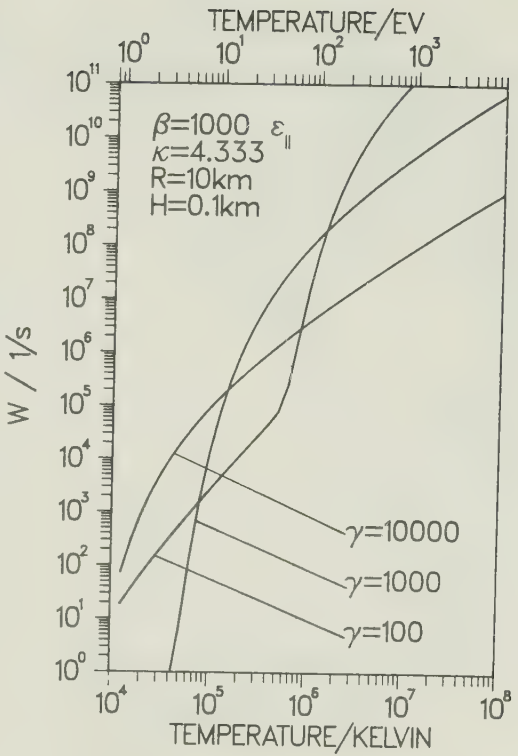


Bild 22

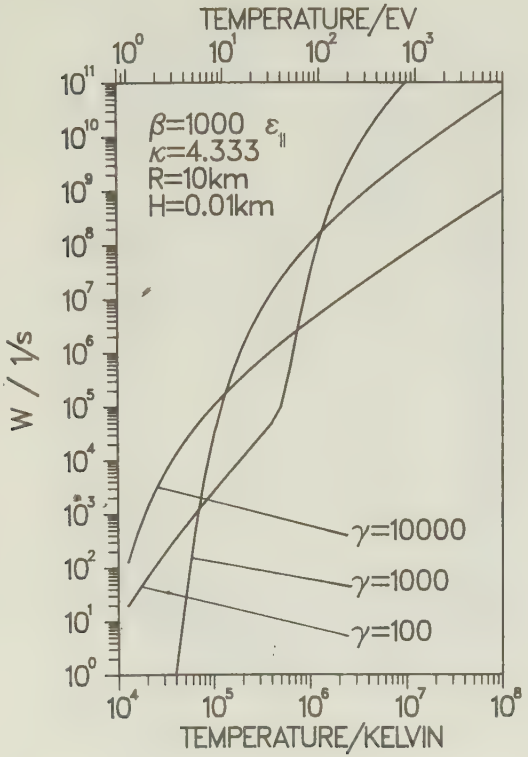


Bild 23

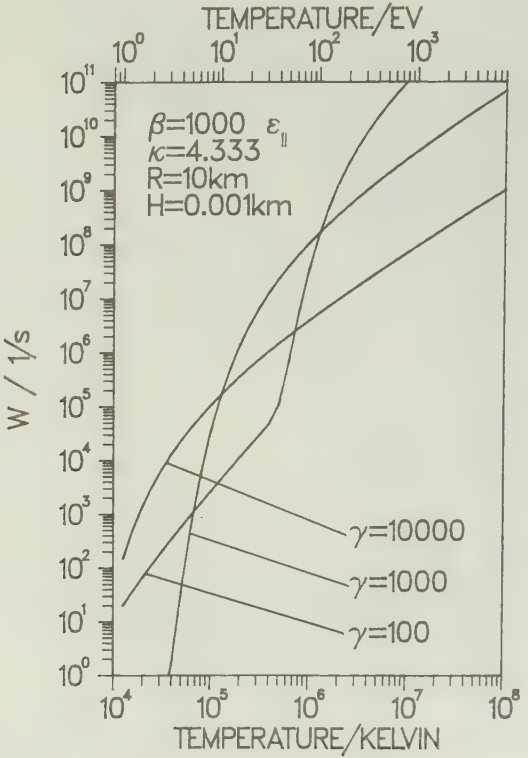


Bild 24

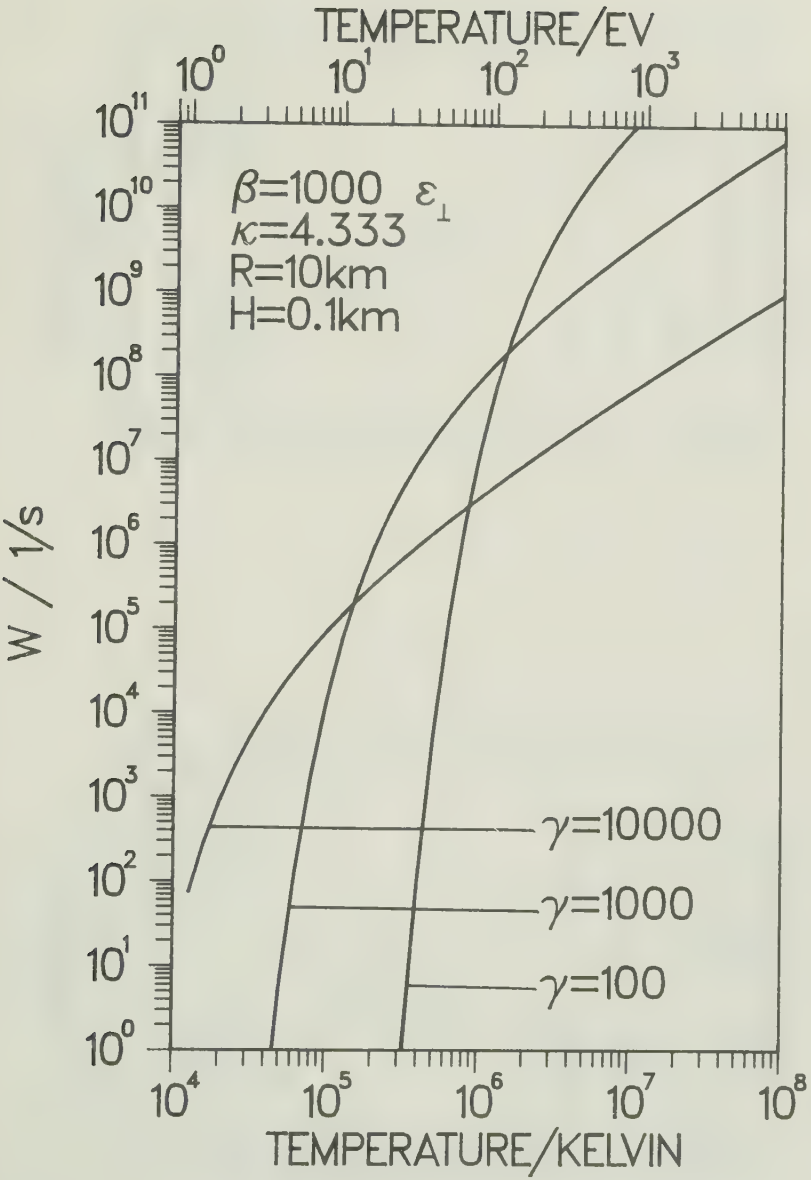

TEMPERATURE/EV
10^0
10^1
10^2
10^3
β=1000 $\varepsilon_\perp$
κ=4.333
R=10km
H=0.1km
W / 1/s
10^{11}
10^{10}
10^9
10^8
10^7
10^6
10^5
10^4
10^3
10^2
10^1
10^0
γ=10000
γ=1000
γ=100
10^4
10^5
10^6
10^7
10^8
TEMPERATURE/KELVIN

Bild 25

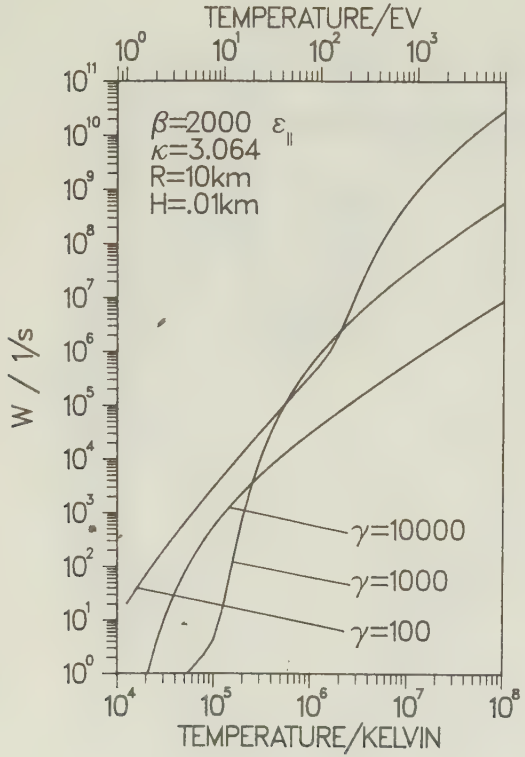


Bild 27

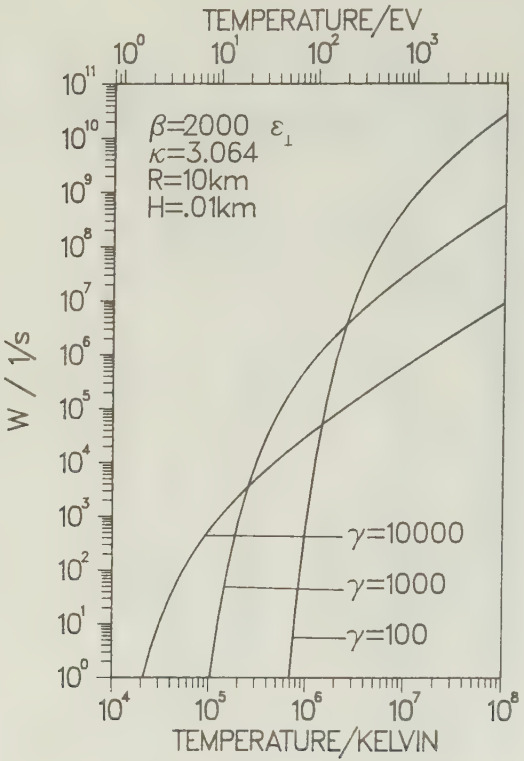


Bild 26

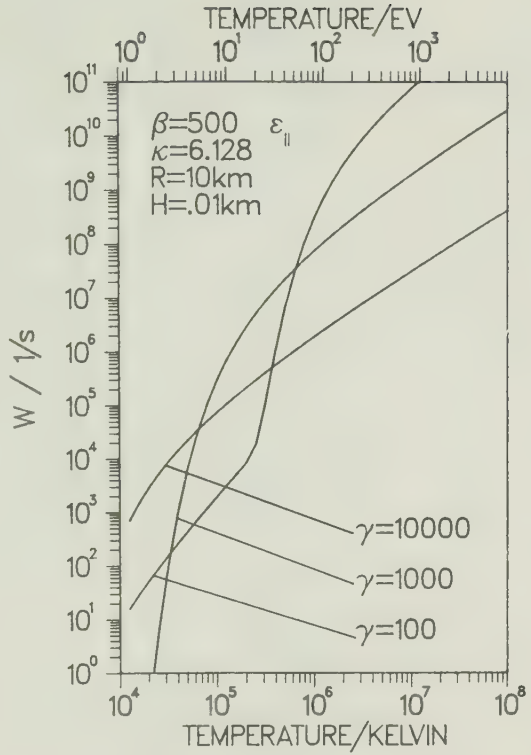


Bild 28

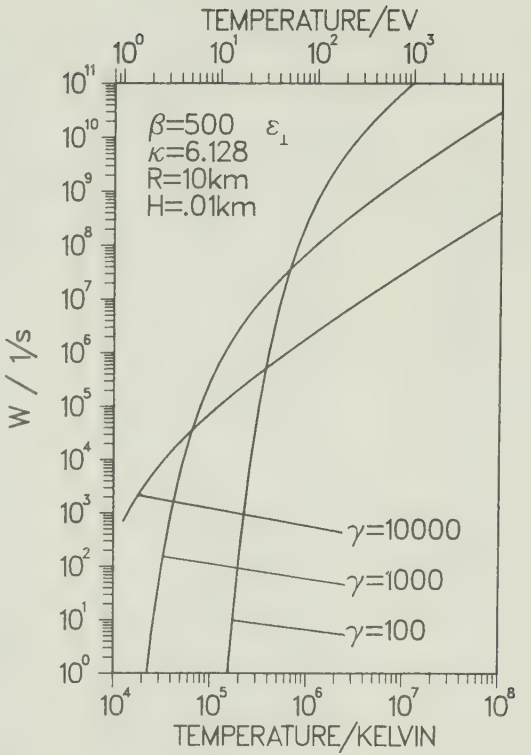


Bild 29

2. Teil

Berechnung von Wasserstoffenergiewerten in Weißen-Zwerg-Magnetfeldern

1. Einleitung

Das Wasserstoffatom im Magnetfeld wurde unter anderem von Rösner in seiner Dissertation und in nachfolgenden Arbeiten sowohl im Hochfeldbereich als auch im Niederfeldbereich ausfürlich behandelt. Trotzdem blieb im Übergangsbereich, der je nach Zustand zwischen $\beta = 0.05$ und $\beta = 1$ liegt (der Magnetfeldparameter $\beta = 1$ ist definiert durch $\beta = B/B_0$ mit $B_0 = 2(\alpha m_e c)^2/(e\hbar) \cong 4.7\,MT$), eine Lücke in den Energiewerten, die noch zu füllen ist.

Im Niederfeldbereich wurden die Lösungen des Hamiltonoperators nach Kugelflächenfunktionen entwickelt:

$$\Psi_m(\mathbf{r}) = \sum_l h_l(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \tag{1}$$

Die Radialfunktionen $h_l(r)$ werden wiederum nach einem vollständigen Orthonormalsystem

$$G_{nl}^{\zeta}(r) = \zeta^{3/2} \sqrt{\frac{n!}{(n+2l+2)!}}\, exp[\frac{-\zeta r}{2}]\,(\zeta r)^l L_n^{(2l+2)}(\zeta r) \tag{2}$$

entwickelt. ζ ist ein Skalen-Parameter von der Dimension einer inversen Länge , und $L_n^{\alpha}(x)$ sind die verallgemeinerten Laguerrepolynome. Mit Hilfe dieser Basis können die Elemente der Hamiltonmatrix analytisch berechnet werden. Die Eigenwerte der Matrix sind die gesuchten Energiewerte.

Im Hochfeldbereich wird die Lösung nach Landaufunktionen entwickelt:

$$\Psi_m(\mathbf{r}) = \sum_N \Phi_{Nm}^{Lan}(\rho, \varphi) f_{Nm}(z) \tag{3}$$

Dies führt zu einem System unendlich vieler gekoppelter Differentialgleichungen für die f_N. Rösner löste es mit einem abgewandelten Froese- Fischer- Verfahren und mit maximal 12 Landaukanälen.

Im folgenden soll nun versucht werden, den Übergangsbereich durch Entwicklung nach Landaufunktionen zu vervollständigen.

2.) Berechnung der Wellenfunktionen durch Entwicklung in der Landau-Basis

a.) Matrixdiadonalisierung

Das Konzept, die Lösungen vollständig nach einem Orthonormalsystem zu entwickeln, und die so resultierende Matrix mit effektiven Routinen zu diagonalisieren, hat sich bei der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen als sehr erfolgreich erwiesen. Deshalb wurde der Versuch unternommen, diese Methode auch auf die Entwicklung nach Landaufunktionen anzuwenden. Es stellt sich also die Aufgabe, ein geeignetes Orthonormalsystem für die Funktionen f_{Nm} aus Gl. (3) zu finden. Die Basisfunktionen des Systems sollten dabei folgendes erfüllen:

> Sie sollten dem Umstand Rechnung tragen, daß die Abstände der Knoten der Lösungsfunktionen f_N in etwa proportional zu $\sqrt{z}$ verhalten, und sie sollten in geeigneter Weise den exponentiellen Abfall beschreiben.

Die z-Parität ist in diesem System eine Erhaltungsgröße. Für positive z-Parität wurde folgende Basis gewählt:

$$G^{\zeta(+)}_{j(p)}(z) = \sqrt{\frac{\zeta}{2}} exp[-\frac{\zeta z}{2}] L^0_j(\zeta z) \qquad (4a)$$

$$G^{\zeta(-)}_{j(p)}(z) = G^{\zeta(+)}_{j(p)}(-z)$$

Für negative Parität entsprechend:

$$G^{\zeta(+)}_{j(n)}(z) = \sqrt{\frac{\zeta}{2}} \sqrt{\frac{j!}{(j+2)!}} exp[-\frac{\zeta z}{2}] L^2_j(\zeta z) \qquad (4b)$$

$$G^{\zeta(-)}_{j(n)}(z) = -G^{\zeta(+)}_{j(n)}(-z)$$

Der Index (+) besagt, daß die Funktion nur auf der positiven z-Achse definiert ist, und die Funktion mit dem Index (-) ist die Fortsetzung auf der negativen z-Achse. Die

verallgemeinerten Laguerrepolynome $L_j^p(z)$ sind definiert durch:

$$L_j^p(z) = \sum_{i=0}^{j} (-1)^i \binom{j-p}{j-i} \frac{1}{i!} z^i$$

Die so definierten G sind orthonormiert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} G^{\zeta}_{j(n,p)}(z) G^{\zeta}_{j'(n,p)}(z) dz = \delta_{jj'}$$

Mit dem Ansatz von Gl.(3) folgt aus der Schrödingergleichung für die Enwicklungsfunktionen f_n:

$$\frac{-d^2}{dz^2} f_N(z) - \sum_{N'=0}^{\infty} V^m_{NN'}(z) f_{N'}(z) + 4\beta N f_N(z) = E f_N(z) \qquad (5)$$

Für die $f_n(z)$ setzt man nun:

$$f_N(z) = \sum_j c_{jN} G^{\zeta}_j(z)$$

und erhält die Eigenwertgleichung:

$$\frac{1}{4}\zeta^2 c_{Nj} + \zeta^2 \sum_{j'} c_{Nj'} a_{jj'} - 4 \sum_{N'j'} c_{N'j'} \int_0^{\infty} V^m_{NN'}(z) G^{\zeta}_j(z) G^{\zeta}_{j'}(z) dz$$
$$+ 4\beta N c_{Nj} = E c_{jN} \qquad (6)$$

wobei die Matrix $a_{jj'}$ für positive Parität die Form hat:

$$a_{jj'} = \begin{pmatrix} 0 & 0.5 & 0.5 & 0.5 & \dots \\ 0.5 & 1 & 1.5 & 1.5 & \dots \\ 0.5 & 1.5 & 2 & 2.5 & \dots \\ 0.5 & 1.5 & 2.5 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad (7a)$$

und für negative Parität:

$$a_{jj'} = \sqrt{\frac{j!j'!}{(j+2)!(j'+2)!}} \left(\frac{2}{3} m(m+1)(2m+1) + m(m+1)(1-j-j') + \right.$$

$$\left. (m+1)(2+jj') \begin{cases} -1/2(m+1)(m+2) & j \neq j' \\ -(m+1)(m+2) & j = j' \end{cases} \right) \qquad (7b)$$

(m = min(j,j'))

Die Potentiale aus Gl.(5) sind gegeben durch:

$$V_{NN'}(z) = -\int_0^\infty \rho d\rho \Psi_{Nm}^{Lan}(\rho) \frac{2}{\sqrt{\rho^2+z^2}} \Psi_{N'm}^{Lan}(\rho) \qquad (8)$$

Bei der Diagonalisierung der Gl.(6) traten nun erhebliche Probleme auf. Zum einen handelt es sich bei Gl. (6) um eine volle Matrix, im Gegensatz zu der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen, bei der nur eine Bandmatrix resultiert. Zum anderen ist das Potential (8) nur numerisch gegeben und es müssen deshalb auch die Matrixelemente numerisch bestimmt werden. Die konkrete Rechnung zeigte nun, daß zuviele Entwicklungsfunktionen $G_j(z)$ benötigt werden, um eine vernünftige Konvergenz der Energieeigenwerte zu erhalten. Als Beispiel sind dazu in Tabelle 1 die Ergebnisse der Rechnung bei m=0, positive z-Parität und eine Magnetfeldstärke β=0.5 aufgelistet. n_{La} ist die Anzahl der verwendeten Landaukanäle und n_z die Anzahl der Entwicklungsfunktionen $G_j(z)$. Man erkennt, daß für niedrigliegende Zustände ($1s_0$, $2s_0$ und $3d_0$') auch bei n_z=58 die Energiewerte nur auf 3 Stellen konvergiert sind. Bei den Übrigen erhält man schon eine Konvergenz von 4-5 Stellen hinter dem Komma. Auch die Konvergenz bei der Erhöhung der Anzahl der Landaukanäle ist noch nicht besonders gut. Aber mit n_z=58 und n_{La}=20 ist man bereits an der Speicherkapazität der Cray 1 angelangt.

$m=0 \quad \pi_z = +1$ $\beta = 0.5$					
n_{La}	n_z	$1s_0$	$2s_0$	$3d'_0$	$3s'_0$
12	58	1.62996824	0.31836378	0.13172763	0.07116259
14	58	1.63322797	0.31862882	0.13180334	0.07119343
16	58	1.63556383	0.31881819	0.13185740	0.07121545
18	58	1.63730248	0.31895881	0.13189753	0.07123179
20	58	1.63863579	0.31906642	0.13192823	0.07124429
20	22	1.56879497	0.28889564	0.12051324	0.06606170
20	26	1.57930306	0.30029642	0.12608335	0.06899753
20	30	1.59018290	0.30821884	0.12921135	0.07036652
20	34	1.60087540	0.31307028	0.13068201	0.07087131
20	38	1.61057334	0.31579014	0.13129684	0.07104041
20	42	1.61885436	0.31724986	0.13155931	0.07110995
20	46	1.62564186	0.31804668	0.13169676	0.07115327
20	50	1.63105973	0.31851895	0.13179063	0.07118827
20	54	1.63531649	0.31883372	0.13186553	0.07121843
20	58	1.63863579	0.31906642	0.13192823	0.07124429
n_{La}	n_z	$4d'_0$	$4s'_0$	$5g'_0$	$5d'_0$
12	58	0.04440462	0.03031041	0.02199440	0.01668282
14	58	0.04442001	0.03031913	0.02199982	0.01668641
16	58	0.04443099	0.03032536	0.02200367	0.01668896
18	58	0.04443914	0.03032998	0.02200654	0.01669086
20	58	0.04444537	0.03033352	0.02200873	0.01669231
20	22	0.04173800	0.02877171	0.02104059	0.01605904
20	26	0.04343695	0.02982824	0.02173398	0.01653308
20	30	0.04409898	0.03017343	0.02192464	0.01664331
20	34	0.04429529	0.03025875	0.02196570	0.01665010
20	38	0.04435350	0.03028352	0.02197828	0.01667232
20	42	0.04438028	0.03029686	0.02198604	0.01667729
20	46	0.04440005	0.03030775	0.02199272	0.01668169
20	50	0.04441725	0.03031749	0.02199876	0.01668570
20	54	0.04443236	0.03032610	0.02200412	0.01668925
20	58	0.04444537	0.03033352	0.02200873	0.01669231

Tabelle 1:
Energiewerte des Wasserstoffatoms in Einheiten der Rydberg-Energie als Ergebnis der Matrixdiagonalisation bei den Konfigurationen n_{La} (Anzahl der Landaukanäle) und n_z (Anzahl der Entwicklunsfunktionen G_j) bei einem Magnetfeld von $\beta=0.5$, der magnetischen Quantenzahl m=0 und positiver z-Parität.

b.) Direkte Integration

Als Ausweg aus den beschriebenen Problemen bietet es sich an , das System der gekoppelten Differntialgleichungen (5) mit Hilfe direkter Integrationsverfahren lösen. Wir folgen in unserem Vorgehen einem von Wintgen vorgeschlagenen Verfahren.

Um das erwartete Verhalten der Knotenabstände richtig zu beschreiben, ist es günstig, eine Koordinatentransformation

$$u^2 = z$$

durchzuführen. Aus (5) wird dann:

$$-\frac{d^2}{du^2}f_N(u)+\frac{1}{u}\frac{d}{du}f_N(u)-4u^2\sum_{N'}V^m_{NN'}(u)f'_N(u)+4u^2(4\beta N-E)f_N(u)=0 \tag{9}$$

Durch den Ansatz:

$$\tilde{f}_N(u)=\frac{1}{\sqrt{u}}f_N(u) \tag{10}$$

fällt der die erste Ableitung enthaltende Term weg. Um die dadurch auftretende schwache Singularität für positive z-Parität zu umgehen, macht man die Substitution:

$$\tilde{f}_N(u)=\chi(u)+g_N(u) \tag{11}$$

$$\text{mit}\qquad \chi(u)=\frac{1}{\sqrt{u}}\begin{cases}1 & \text{für positive z-Parität}\\ u^2 & \text{für positive z-Parität}\end{cases}$$

Die $g_N(u)$ gehorchen der Differentialgleichung:

$$\left[\frac{d^2}{du^2}-\frac{3}{4}\frac{1}{u^2}+4\left(E-4\beta N-2V^m_{NN}\right)u^2\right](\chi+g_N)-4\sum_{N\neq N'}u^2V^m_{NN'}g_{N'}=0 \tag{12}$$

Ist N_c die maximale Anzahl der Kanäle, die zur Berechnung mitgenommen werden, so gibt es N_c linear unabhängige Lösungen. Die den physikalischen Zustand beschreibende Linearkombination wird durch die Randbedinung festgelegt, daß die Wellenfunktion normierbar sein muß.

Die Anfangsbedingungen für die linear unabhängigen Lösungen können folgendermaßen gewählt werden:

Für positive z-Parität:

$$f^i_N(0) = \begin{cases} 1 & \text{für } N = i \\ 0 & \text{für } N \neq i \end{cases} \qquad (13a)$$

$$f'^i_N(0) = 0$$

Für negative z-Parität:

$$f^i_N(0) = 0 \qquad (13b)$$

$$f'^i_N(0) = \begin{cases} 1 & \text{für } N = i \\ 0 & \text{für } N \neq i \end{cases}$$

Die Differentialgleichung (12) wird mit der Diskretisierung

$$g_+ - 2g_0 + g_- = \frac{h^2}{12}(13g''_0 - 2g''_- + g''_=) + \frac{h^5}{12}g(v) \qquad (14)$$

integriert. Hierbei bedeutet h die Zeitschrittweite, und g_+, g_0, g_-, $g_=$ die Funktionen zu den Zeiten g(t+h), g(t), g(t-h), g(t-2h).

Da die Wellenfunktionen in den Kanälen, deren Energie weit von der Bindungsenergie entfernt liegen, sehr schnell abfallen, werden in dem numerischen Verfahren die Kanäle nach und nach abgekoppelt, bis nur noch ein Kanal übrig ist, der dann für die Bestimmung der Bindungsenergie benutzt wird.

3. Einige Ergebnisse

Die Ergebnisse der Rechnungen sind in den folgenden Tabellen nach den Erhaltungsgrößen m (z-Komponente des Drehimpulses) und π_z (z-Parität) charakterisiert. Als weiteres Merkmal wurde die Knotenzahl der z-Wellenfunktion im nullten Landaukanal verwendet. Die Energiewerte sind in Einheiten der Rydbergenergie ($-E_R$) angegeben.

In der Tabelle 2 sind für m=0 π_z=-1 und die Knotenzahl ν=7 bei verschiedenen β die Ergebnisse aufgelistet und mit bisherigen Rechnungen verglichen. In der 2. Spalte sind die Energiewerte eingetragen, die nach diesem hier beschriebenen direkten Integrationsverfahren für n=12,24,36,48 und 60 Kanäle erhalten wurden. Die Werte in Klammern sind die von Rösner bestimmten Werte. Die letzte Zahl bei jedem β ist ein extrapolierter unterer Grenzwert. In der 3. Spalte ist die Identifikation des Zustandes mit bisherigen Ergebnissen eingetragen. Als weiters sieht man in dieser Spalte die Ergebnisse aus der Diagonalisierung in der sphärischen Basis. n_r gibt die Anzahl der dabei verwendeten Radialfunktionen und n_l die Anzahl der Kugelflächenfunktionen an.

Man erkennt bei den größeren β-Werten eine gute Übereinstimmung der Werte, die mit dem hier beschriebenen Verfahren für 12 Kanäle erhalten worden sind, mit den Werten von Rösner, die ebenfalls mit 12 Landaukanälen bestimmt worden sind. Wenn man in der 2. Spalte die Werte bei steigendem n betrachtet, so kann man aus deren Konvergenz sogar einige Stellen mehr angeben.

Bis zu einem Magnetfeld von β=0.03 läßt sich der Zustand mit dem 4p0-Zustand bisheriger Rechnungen identifizieren. Beim nächsten β-Wert von 0.02 wird der Zustand plötzlich mit dem 5f0, also dem nächst höherem Zustand identifiziert. Wir haben hier ein Anticrossing überschritten. Die Charakteristik des 4p0-Zustandes übernimmt der 5f0-Zustand,

als ob sich die Zustände ungehindert kreuzen würden.

Zur Verdeutlichung sind die z-Wellenfunktionen der ersten 12 Landaukanäle in den Bildern 1a - 2b für 2 β-Werte aufgezeichnet. Bild 1a zeigt die Wellenfunktionen für β=0.1 und Bild 1b eine Ausschnittsvergrößerung am Ursprung. Aus Symmetriegründen ist nur die positive z-Achse gezeichnet. Als Einheit für die z-Achse ist ein Bohrscher Radius gewählt und die Einheit auf der senkrechten Achse ist so gewählt, daß die Steigung des nullten Kanals im Ursprung 1 ergibt. Die restlichen Kanäle sind dazu im richtigen Verhältnis gemalt. Man erkennt die 3 Knoten des nullten Landaukanals auf der positiven Achse, die mit dem im Ursprung und den 3 auf der negativen Seite insgesamt 7 ergeben. Weiter sieht man die deutliche Dominanz des nullten Kanals sowohl im Innen-, wie auch im Außenbereich, während die übrigen Kanäle mit wachsendem n schnell kleiner werden.

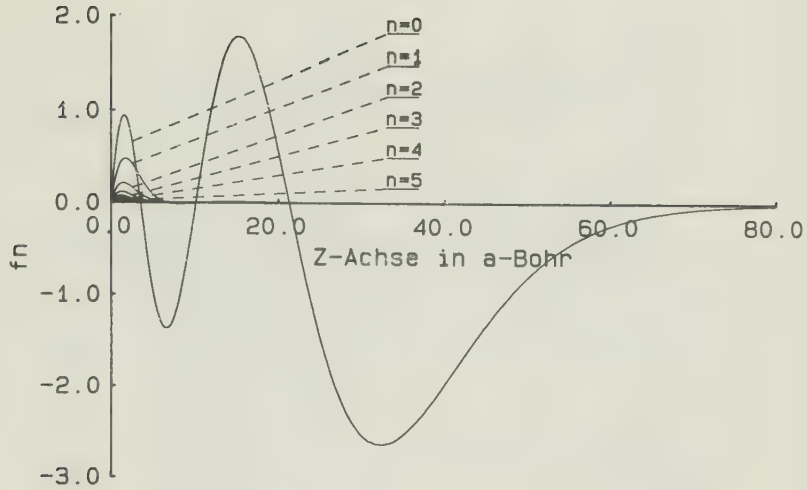
Auf dem Bild 2a sind die Funktionen für β=0.01 gezeichnet. Bild 2b zeigt wiederum eine Ausschnittsvergrößerung am Ursprung. Da wir hier das Anticrossing bereits überschritten haben, handelt es sich hier nicht mehr um den 4p0-Zustand wie auf den Bildern 1a und 1b, sondern um den 5f0-Zustand. Die Dominanz des nullten Kanals im Ursprung ist hier bereits völlig verloren gegangen. Man beachte, daß für den gezeigetn Fall der Energiewert bei 60 Konfigurationen erst mit 2 Stellen konvergiert ist.

In Tabelle 3 sind die Ergebnisse für m=0 π_z=+1 und ν=12 eingetragen. Hier werden 2 Anticrossings überschritten. Bei β=0.3 wird der Zustand noch mit dem 5g0 identifiziert. Bei β=0.2 erkennt man bei steigendem n keine Konvergenz des Energiewertes mehr, während bei β=0.15 der Zustand zum 5d0 konvergiert. Zwischen β=0.05 und 0.03 überschreitet man den 2. Kreuzungspunkt zum 5s0.

In den Bildern 3a - 5b sind wieder die z-Wellenfunktionen der ersten 12 Kanäle gezeichnete. Da hier die z-Parität positiv ist, wurde die Skalierung der senkrechten Achse so gewählt, daß der nullten Landaukanal immer den Wert 1 bei z=0 hat. Bei Bild 3a wurde für β=0.3 gewählt. Bild 3b ist wieder eine Ausschnittsvergrößerung am Ursprung. Es handelt sich hier noch um den 5g0-Zustand. Bei 4a und 4b ist β=0.07 und der Zustand wird mit 5d0 identifiziert. Bei 5a und 5b ist β=.002 und der Zustand ist in den 5s0 übergegangen.

$\nu = 7$ m=0 $\pi = -1$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.010	0.043734975242	n=12	
	0.044734973335	n=24	
	0.045420556450	n=36	$5f_0'$
	0.045558398628	n=48	
	0.045624329948	n=60	
	0.04588	extr.	0.0459321586 n_τ=30 n_l=30
0.015	0.043566770143	n=12	
	0.044386642045	n=24	
	0.044592767305	n=36	$5f_0'$
	0.044668963975	n=48	
	0.044704106874	n=60	
	0.04484	extr.	0.0447776411 n_τ=30 n_l=30
0.020	0.041674887169	n=12	
	0.041922375191	n=24	
	0.041982618797	n=36	$5f_0'$
	0.042004475105	n=48	
	0.042014437187	n=60	
	0.042054	extr.	0.0420348373 n_τ=30 n_l=31
0.030	0.049059157886	n=12	
	0.049353063144	n=24	
	0.049404075184	n=36	$4p_0'$
	0.049420445957	n=48	
	0.049427447834	n=60	
	0.049455	extr.	0.0494323 n_τ=40 n_l=40
0.050	(0.0460	n=3)	
	0.047630825422	n=12	
	0.047747667692	n=24	
	0.047767036818	n=36	$4p_0'$
	0.047773115538	n=48	
	0.047775684736	n=60	
	0.047786	extr.	0.0477797898 n_τ=42 n_l=48
0.070	(0.04784	n=12)	
	0.047841164079	n=12	
	0.047893183198	n=24	
	0.047901432481	n=36	$4p_0'$
	0.047903982606	n=48	
	0.047905048814	n=60	
	0.0479093	extr.	0.0479068260 n_τ=50 n_l=60
0.100	(0.048517	n=12)	
	0.048517336380	n=12	
	0.048540245544	n=24	
	0.048543737899	n=36	$4p_0'$
	0.048544800293	n=48	
	0.048545240890	n=60	
	0.0485470	extr.	0.0485460015 n_τ=60 n_l=63
0.150	(0.049565	n=12)	
	0.049564569095	n=12	
	0.049574317554	n=24	
	0.049575753788	n=36	$4p_0'$
	0.049576182941	n=48	
	0.049576360325	n=60	
	0.0495770	extr.	

Tabelle 2: π_Z=-1 m=0 ν=7



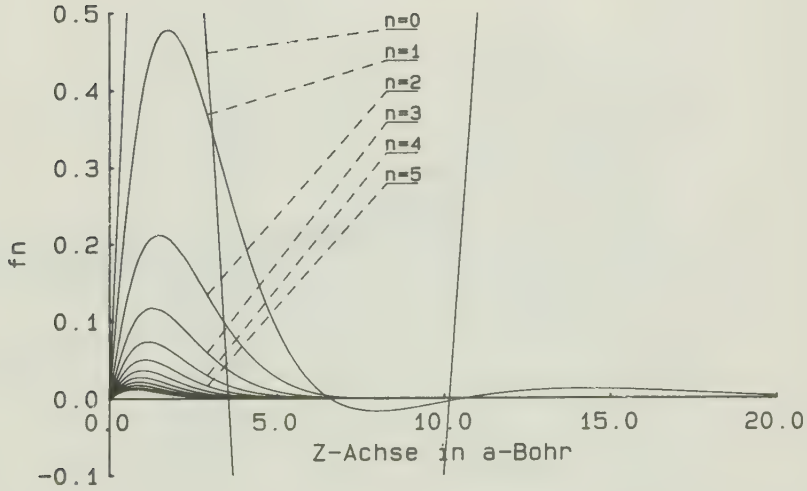


Bild 1a und 1b: die ersten 12 Landaukanäle bei β=0.1 m=0
π_z=-1 ν=7

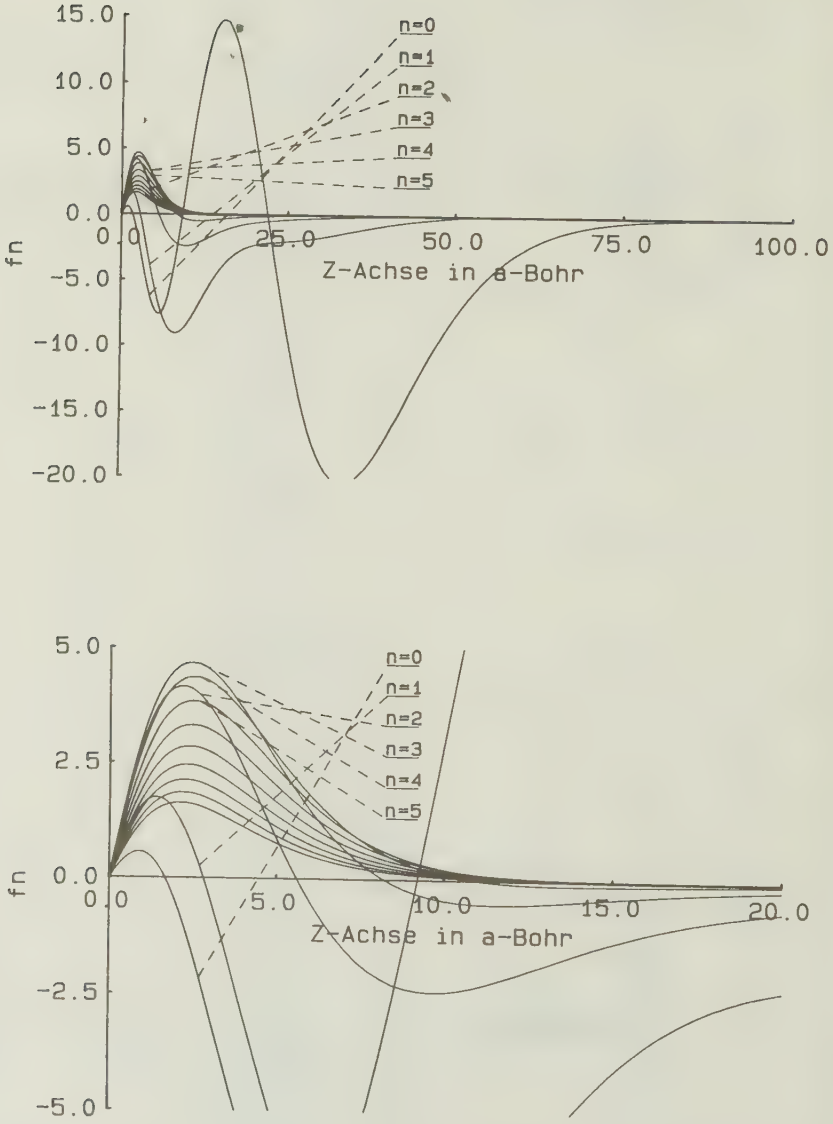
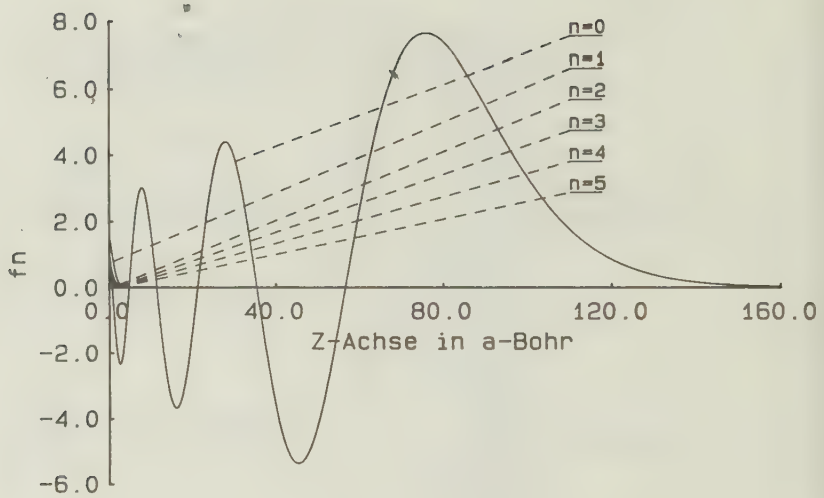


Bild 2a und 2b: die ersten 12 Landaukanäle bei β=0.01 m=0 π_z=-1 ν=7

$\nu = 12$ m=0 $\pi = +1$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.020	0.017928235566	n=12	
	0.017977748811	n=24	
	0.017982938325	n=36	$5s'_0$
	0.017984255158	n=48	
	0.017984754121	n=60	
	0.0179867	extr.	0.0179854632 n_r=49 n_l=52
0.030	0.017130716823	n=12	
	0.017535724163	n=24	
	0.017638438446	n=36	$5s'_0$
	0.017684173107	n=48	0.0177849486 n_r=58 n_l=60
0.050	0.020096612396	n=12	
	0.020519874096	n=24	
	0.020729357004	n=36	$5d'_0$
	0.020846877098	n=48	
	0.020919831991	n=60	
	0.021212	extr.	0.0211641959 n_r=75 n_l=80
0.070	0.019370944364	n=12	
	0.019381739958	n=24	
	0.019386355741	n=36	$5d'_0$
	0.019388810881	n=48	
	0.019390295561	n=60	
	0.0193962	extr.	0.019395 n_r=80 n_l=80
0.100	0.018773243529	n=12	
	0.018825280578	n=24	
	0.018838419921	n=36	$5d'_0$
	0.018844103820	n=48	
	0.018847178466	n=60	
	0.0188594	extr.	0.01885 n_r=80 n_l=80
0.150	0.017415673298	n=12	
	0.017603095882	n=24	
	0.017655603998	n=36	$5d'_0$
	0.017678827900	n=48	
	0.017691506427	n=60	
	0.017742	extr.	0.017 n_r=80 n_l=80
0.200	0.022143936872	n=12	$5g'_0$
	0.022294926167	n=24	0.0223 n_r=82 n_l=82
0.200	0.016931689501	n=36	
	0.016945189501	n=48	$5d'_0$
	0.016952586889	n=60	0.016 n_r=82 n_l=82
0.300	0.021878487782	n=12	
	0.021932075123	n=24	
	0.021947292713	n=36	$5g'_0$
	0.021954017261	n=48	
	0.021957674793	n=60	
	0.021972	extr.	0.021 n_r=82 n_l=82

Tabelle 3: π_z=+1 m=0 ν=12



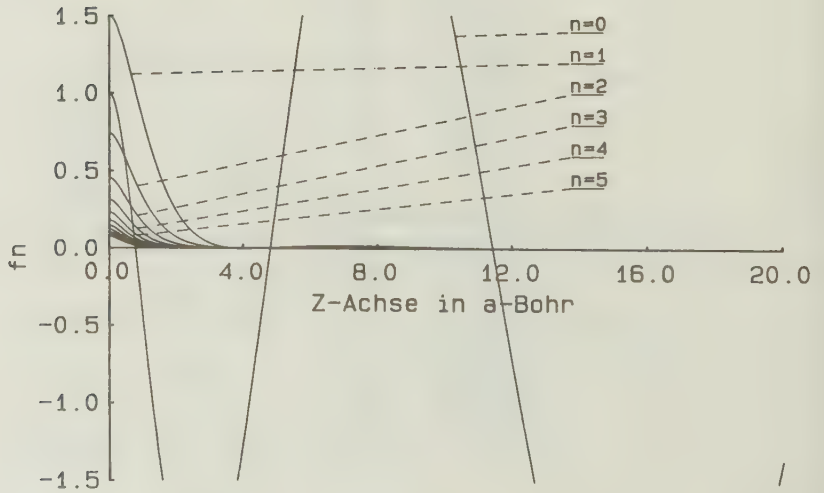


Bild 3a und 3b: die ersten 12 Landaukanäle bei β=0.3 m=0
π_z=+1 ν=12

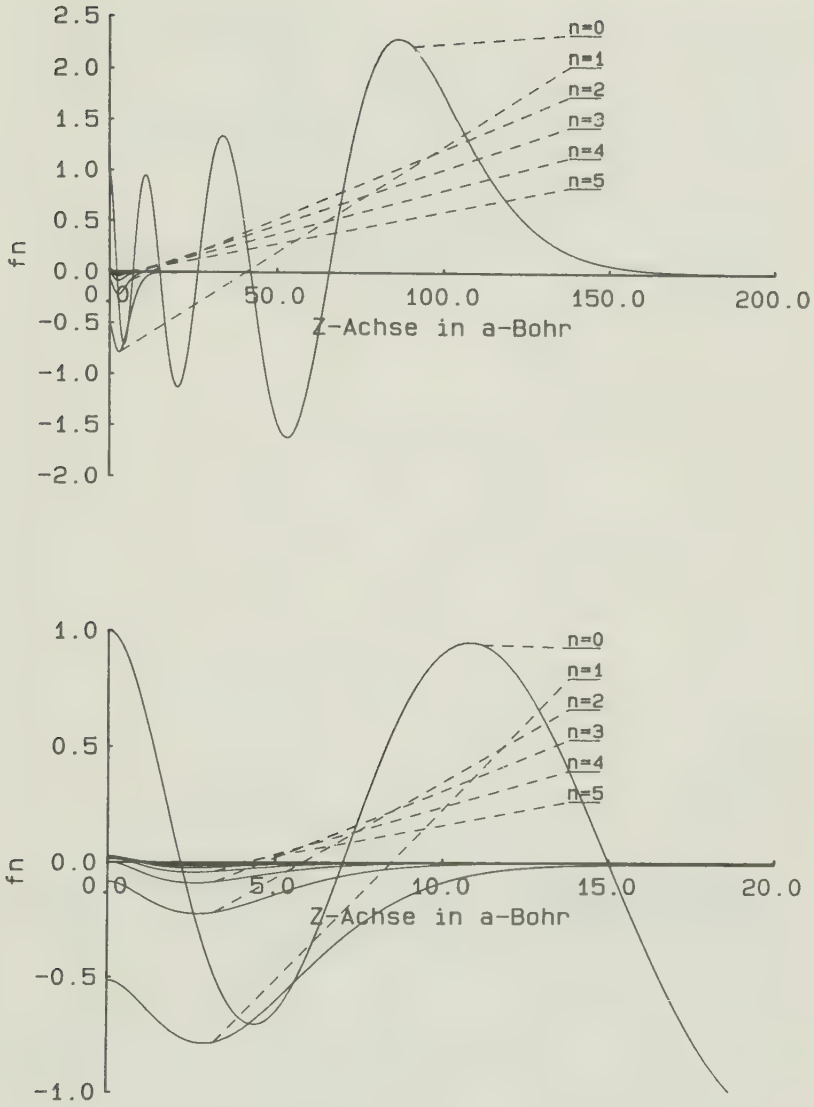
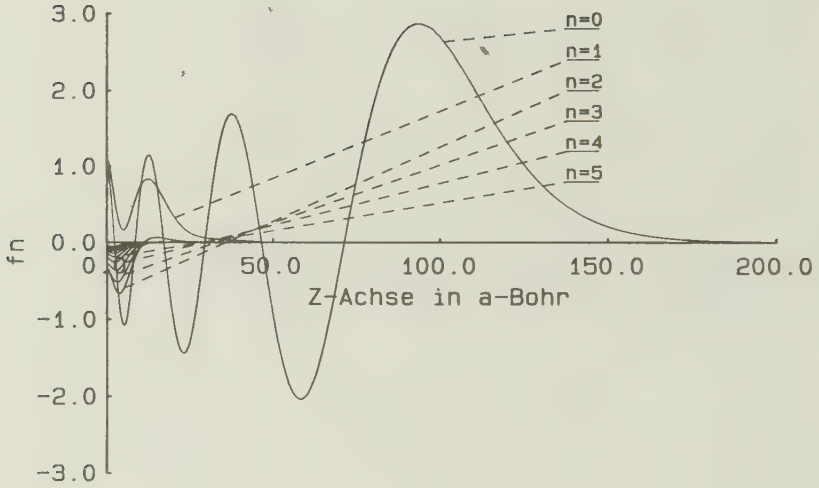


Bild 4a und 4b: die ersten 12 Landaukanäle bei β=0.07 m=0
π_z=+1 ν=12



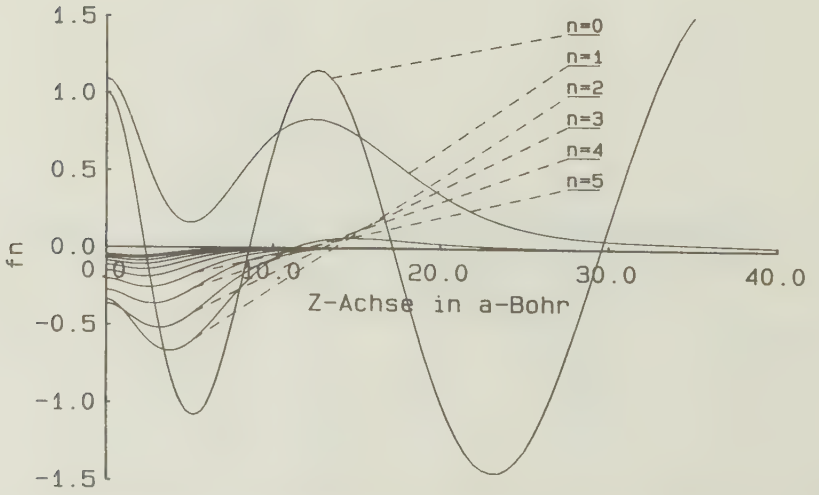


Bild 5a und 5b: die ersten 12 Landaukanäle bei β=0.02 m=0
π_z=+1 v=12

In den nachfolgenden Tabelle 4 sind noch die Energiewerte für einige Zustände negativer Parität und m=0, also 2p0, 3p0, 4f0, 4p0, 5f0 und 5p0 bei verschiedenen β eingetragen. Die 1. Zahl in Klammern bei jedem β-Wert in der 2. Spalte ist wieder der von Rösner berechnete Energiewert. Die letze Zahl ist ein extrapolierter unterer Grenzwert. In der 3.Spalte sind die durch Diagonalisierung in sphärischer Basis erhaltenen Werte eingetragen.

$\nu = 1$ m=0 $\pi = -1$ $(=2p_0)$					
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**		**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**		
0.020	0.27914845943	n=12			
	0.28367173672	n=24			
	0.28465039730	n=36			
	0.28499467373	n=48			
	0.28514935970	n=60			
	0.28576	extr.	0.285387420	n_r=4	n_l=7
0.030	0.29685962200	n=12			
	0.29925698853	n=24			
	0.29971496582	n=36			
	0.29985705853	n=48			
	0.29993430614	n=60			
	0.30024	extr.	0.300032537	n_r=4	n_l=7
0.050	0.32352554798	n=12			
	0.32452213764	n=24			
	0.32470929623	n=36			
	0.32476377010	n=48			
	0.32478711605	n=60			
	0.32488	extr.	0.324820157	n_r=6	n_l=8
0.070	0.34451915560	n=12			
	0.34508804321	n=24			
	0.34517943859	n=36			
	0.34520781040	n=48			
	0.34521973133	n=60			
	0.345267	extr.	0.345236453	n_r=7	n_l=8
0.100	0.36997768402	n=12			
	0.37029094696	n=24			
	0.37033889771	n=36			
	0.37035354614	n=48			
	0.37035964966	n=60			
	0.370384	extr.	0.370368082	n_r=8	n_l=9
0.150	0.40280590057	n=12			
	0.40296993256	n=24			
	0.40299396515	n=36			
	0.40300121307	n=48			
	0.40300426483	n=60			
	0.4030164	extr.	0.403008291	n_r=10	n_l=15
0.200	0.42840101364	n=12			
	0.42850674769	n=24			
	0.42852194969	n=36			
	0.42852669027	n=48			
	0.42852848843	n=60			
	0.4285356	extr.	0.428531005	n_r=12	n_l=17

Tabelle 4a: π_z=-1 m=0 ν=1

$\nu = 1$ m=0 $\pi = -1$ $(=2p_0)$			
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**		**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
0.300	0.46728488392	n=12	
	0.46734388634	n=24	
	0.46735226538	n=36	
	0.46735458303	n=48	
	0.46735547444	n=60	
	0.4673590	extr.	0.467356935 n_r=13 n_l=18
0.500	0.51997737885	n=12	
	0.52000675201	n=24	
	0.52001094818	n=36	
	0.52001209259	n=48	
	0.52001247406	n=60	
	0.5200139	extr.	0.520013233 n_r=16 n_l=20
0.700	0.55624375455	n=12	
	0.55626295776	n=24	
	0.55626539803	n=36	
	0.55626626180	n=48	
	0.55626656844	n=60	
	0.5562677	extr.	0.556267004 n_r=22 n_l=22
1.000	(0.595407	n=12)	
	0.59540695190	n=12	
	0.59541946411	n=24	
	0.59542098013	n=36	
	0.59542146256	n=48	
	0.59542165982	n=60	
	0.5954224	extr.	0.595421949 n_r=23 n_l=23
1.500	(0.640071	n=12)	
	0.64007121216	n=12	
	0.64007876221	n=24	
	0.64007976929	n=36	
	0.64008006104	n=48	
	0.64008017944	n=60	
	0.6400806	extr.	0.640080169 n_r=24 n_l=24
2.000	(0.671385	n=12)	
	0.67138496460	n=12	
	0.67139032471	n=24	
	0.67139103638	n=36	
	0.67139124268	n=48	
	0.67139132446	n=60	
	0.67139165	extr.	0.67139013 n_r=24 n_l=24
3.000	(0.714320	n=12)	
	0.71431962036	n=12	
	0.71432293945	n=24	
	0.71432337769	n=36	
	0.71432350586	n=48	
	0.71432355859	n=60	
	0.71432377	extr.	

Tabelle 4a: π_Z=-1 m=0 ν=1

$\nu = 3$ m=0 $\pi = -1$ $(=3p_0')$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.010	0.11778280858	n=12	
	0.12231774145	n=24	
	0.12359493308	n=36	
	0.12354759676	n=48	
	0.12434107185	n=60	
	0.1275	extr.	0.124757124 n_r=5 n_l=9
0.015	0.12413952949	n=12	
	0.12705719485	n=24	
	0.12775262051	n=36	
	0.12800740059	n=48	
	0.12812049307	n=60	
	0.12857	extr.	0.128303668 n_r=6 n_l=11
0.020	0.12592452785	n=12	
	0.13007083734	n=24	
	0.13049894219	n=36	
	0.13064808725	n=48	
	0.13071367444	n=60	
	0.13097	extr.	0.130812761 n_r=7 n_l=11
0.030	0.13302079612	n=12	
	0.13407209802	n=24	
	0.13427145907	n=36	
	0.13433753351	n=48	
	0.13436633360	n=60	
	0.13448	extr.	0.134406521 n_r=10 n_l=12
0.050	0.13926417979	n=12	
	0.13967122407	n=24	
	0.13973995571	n=36	
	0.13976181140	n=48	
	0.13977108820	n=60	
	0.13980	extr.	0.139783382 n_r=12 n_l=18
0.070	0.14400116775	n=12	
	0.14421023926	n=24	
	0.14424379649	n=36	
	0.14425425117	n=48	
	0.14425854340	n=60	
	0.144275	extr.	0.144264252 n_r=14 n_l=20
0.100	0.14972106333	n=12	
	0.14982535359	n=24	
	0.14984124236	n=36	
	0.14984615811	n=48	
	0.14984833026	n=60	
	0.1498570	extr.	0.149850912 n_r=16 n_l=20
0.150	0.15695296945	n=12	
	0.15700194541	n=24	
	0.15700901260	n=36	
	0.15701128858	n=48	
	0.15701212711	n=60	
	0.1570154	extr.	0.157013411 n_r=18 n_l=23

Tabelle 4b: π_z=-1 m=0 ν=3

$\nu = 3$ m=0 $\pi = -1$ $(=3p_0')$			
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**		**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
0.200	0.16240942659	n=12	
	0.16243879292	n=24	
	0.16244313051	n=36	
	0.16244449378	n=48	
	0.16244486559	n=60	
	0.1624463	extr.	0.162445672 n_r=21 n_l=24
0.300	(0.170348	n=12)	
	0.17034804277	n=12	
	0.17036298878	n=24	
	0.17036519838	n=36	
	0.17036576519	n=48	
	0.17036602105	n=60	
	0.17036704	extr.	0.170365935 n_r=22 n_l=23
0.500	(0.180441	n=12)	
	0.18044066892	n=12	
	0.18044749631	n=24	
	0.18044843747	n=36	
	0.18044871213	n=48	
	0.18044882566	n=60	
	0.18044927	extr.	
0.700	(0.186979	n=12)	
	0.18697907722	n=12	
	0.18698324348	n=24	
	0.18698381110	n=36	
	0.18698397590	n=48	
	0.18698404304	n=60	
	0.18698431	extr.	
1.000	(0.1937062	n=12)	
	0.19370613101	n=12	
	0.19370864078	n=24	
	0.19370897867	n=36	
	0.19370907828	n=48	
	0.19370911929	n=60	
	0.19370928	extr.	
1.500	(0.2010007	n=12)	
	0.20100065730	n=12	
	0.20100209675	n=24	
	0.20100229011	n=36	
	0.20100234284	n=48	
	0.20100236823	n=60	
	0.20100246	extr.	
2.000	(0.2059002	n=12)	
	0.20590013648	n=12	
	0.20590111109	n=24	
	0.20590124195	n=36	
	0.20590127906	n=48	
	0.20590129664	n=60	
	0.20590136	extr.	
3.000	(0.2123613	n=12)	
	0.21236128117	n=12	
	0.21236186125	n=24	
	0.21236193742	n=36	
	0.21236195109	n=48	
	0.21236196477	n=60	
	0.212362019	extr.	

Tabelle 4b: π_z=-1 m=0 ν=3

$\nu = 5$ m=0 $\pi = -1$ $(=4f_0')$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.030	0.075363694188	n=12	
	0.075924759043	n=24	
	0.076028214869	n=36	
	0.076062205755	n=48	
	0.076076713469	n=60	
	0.076134	extr.	0.0761384141 n_r=22 n_l=23
0.050	(0.0745	n=4)	
	0.076213027097	n=12	
	0.076418282213	n=24	
	0.076452680701	n=36	
	0.076463529852	n=48	
	0.076468080141	n=60	
	0.076486	extr.	0.0764795717 n_r=20 n_l=23
0.070	(0.07738	n=12)	
	0.077380887872	n=12	
	0.077478298810	n=24	
	0.077493785958	n=36	
	0.077498634050	n=48	
	0.077500644360	n=60	
	0.0775086	extr.	0.0775058907 n_r=50 n_l=60
0.100	(0.07913	n=12)	
	0.079132166120	n=12	
	0.079177204416	n=24	
	0.079184090861	n=36	
	0.079186144892	n=48	
	0.079186990691	n=60	
	0.0791904	extr.	0.0791896053 n_r=60 n_l=63
0.150	(0.081535	n=12)	
	0.081534555703	n=12	
	0.081554415017	n=24	
	0.081557340127	n=36	
	0.081558217507	n=48	
	0.081558582192	n=60	
	0.0815600	extr.	
0.200	(0.083385	n=12)	
	0.083384677870	n=12	
	0.083396234266	n=24	
	0.083397900526	n=36	
	0.083398399794	n=48	
	0.083398769548	n=60	
	0.0833401	extr.	
0.300	(0.086074	n=12)	
	0.086073968064	n=12	
	0.086079628465	n=24	
	0.086080425332	n=36	
	0.086080661180	n=48	
	0.086080757363	n=60	
	0.0860811	extr.	

Tabelle 4c: π_z=-1 m=0 ν=5

$\nu = 5$ m=0 $\pi = -1$ $(=4f_0')$		
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**	**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
0.500	(0.0894514 n=12)	
	0.089451264874 n=12	
	0.089453724591 n=24	
	0.089454062726 n=36	
	0.089454164044 n=48	
	0.089454204328 n=60	
	0.08945436 extr.	
0.700	(0.0916065 n=12)	
	0.091606435789 n=12	
	0.091607901854 n=24	
	0.091608103270 n=36	
	0.091608160643 n=48	
	0.091608183836 n=60	
	0.09160827 extr.	
1.000	(0.0937956 n=12)	
	0.093795548738 n=12	
	0.093796414216 n=24	
	0.093796530183 n=36	
	0.093796563142 n=48	
	0.093796576570 n=60	
	0.09379663 extr.	
1.500	(0.0961373 n=12)	
	0.096137331420 n=12	
	0.096137816039 n=24	
	0.096137880736 n=36	
	0.096137901488 n=48	
	0.096137907592 n=60	
	0.096137932 extr.	
3.000	(0.09972083 n=12)	
	0.099720825049 n=12	
	0.099721011817 n=24	
	0.099721035010 n=36	
	0.099721043555 n=48	
	0.099721044776 n=60	
	0.0997210496 extr.	

Tabelle 4c: π_z=-1 m=0 ν=5

$\nu = 7$ m=0 $\pi = -1$ $(=4p_0')$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.050	(0.0460	n=3)	
	0.047630825422	n=12	
	0.047747667692	n=24	
	0.047767036818	n=36	
	0.047773115538	n=48	
	0.047775684736	n=60	
	0.047785	extr.	0.0477797898 n_r=42 n_l=48
0.070	(0.04784	n=12)	
	0.047841164079	n=12	
	0.047893183198	n=24	
	0.047901432481	n=36	
	0.047903982606	n=48	
	0.047905048814	n=60	
	0.0479093	extr.	0.0479068260 n_r=50 n_l=60
0.100	(0.048517	n=12)	
	0.048517336380	n=12	
	0.048540245544	n=24	
	0.048543737899	n=36	
	0.048544800293	n=48	
	0.048545240890	n=60	
	0.0485470	extr.	0.0485460015 n_r=60 n_l=63
0.150	(0.049565	n=12)	
	0.049564569095	n=12	
	0.049574317554	n=24	
	0.049575753788	n=36	
	0.049576182941	n=48	
	0.049576360325	n=60	
	0.0495770	extr.	
0.200	(0.050392	n=12)	
	0.050392368819	n=12	
	0.050397940184	n=24	
	0.050398743178	n=36	
	0.050398981597	n=48	
	0.050399082686	n=60	
	0.05039948	extr.	
0.300	(0.0516011	n=12)	
	0.051601039505	n=12	
	0.051603711700	n=24	
	0.051604091263	n=36	
	0.051604203796	n=48	
	0.051604247665	n=60	
	0.05160442	extr.	
0.500	(0.0531137	n=12)	
	0.053113694861	n=12	
	0.053114834693	n=24	
	0.053114991858	n=36	
	0.053115039160	n=48	
	0.053115055945	n=60	
	0.05311512	extr.	

Tabelle 4d: π_Z=−1 m=0 ν=7

$\nu = 7$ m=0 $\pi = -1$ $(=4p_0')$		
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**	**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
0.700	(0.0540730 n=12)	
	0.054072982379 n=12	
	0.054073652240 n=24	
	0.054073745318 n=36	
	0.054073771258 n=48	
	0.054073781939 n=60	
	0.05407382 extr.	
1.000	(0.0550418 n=12)	
	0.055041770636 n=12	
	0.055042162787 n=24	
	0.055042216193 n=36	
	0.055042232977 n=48	
	0.055042237555 n=60	
	0.055042255 extr.	
1.500	(0.05607162 n=12)	
	0.056071613159 n=12	
	0.056071831360 n=24	
	0.056071860352 n=36	
	0.056071867981 n=48	
	0.056071869507 n=60	
	0.056071875 extr.	
2.000	(0.05675158 n=12)	
	0.056751571526 n=12	
	0.056751716484 n=24	
	0.056751736321 n=36	
	0.056751740898 n=48	
	0.056751742424 n=60	
	0.056751748 extr.	
3.000	(0.05763435 n=12)	
	0.057634351356 n=12	
	0.057634435280 n=24	
	0.057634445961 n=36	
	0.057634447487 n=48	
	0.057634449013 n=60	
	0.057634455 extr.	

Tabelle 4d: π_Z=-1 m=0 ν=7

$\nu = 9$ m=0 $\pi_z = -1$ $(=5f_0')$			
β	direkte Integration in der Landau-Basis		Diagonalisierung in der sphärischen Basis
0.070	0.032370881175	n=12	
	0.032401537608	n=24	
	0.032406385325	n=36	
	0.032407882212	n=48	
	0.032408506297	n=60	
	0.0324112	extr.	0.0324097116 n_r=60 n_l=62
0.100	0.032680361869	n=12	
	0.032693437125	n=24	
	0.032695428397	n=36	
	0.032696034171	n=48	
	0.032696285941	n=60	
	0.0326973	extr.	0.0326967416 n_r=70 n_l=84
0.150	(0.033224	n=12)	
	0.033224286310	n=12	
	0.033229735224	n=24	
	0.033230536310	n=36	
	0.033230775873	n=48	
	0.033230875056	n=60	
	0.0332312	extr.	
0.200	(0.0336634	n=12)	
	0.033663326907	n=12	
	0.033666407656	n=24	
	0.033666851687	n=36	
	0.033666984438	n=48	
	0.033667037844	n=60	
	0.03366725	extr.	
0.300	(0.0343067	n=12)	
	0.034306709663	n=12	
	0.034308169930	n=24	
	0.034308375923	n=36	
	0.034308438484	n=48	
	0.034308464424	n=60	
	0.03430856	extr.	
0.500	(0.0351106	n=12)	
	0.035110529493	n=12	
	0.035111144423	n=24	
	0.035111231398	n=36	
	0.035111254286	n=48	
	0.035111264967	n=60	
	0.03511130	extr.	
0.700	(0.0356184	n=12)	
	0.035618400888	n=12	
	0.035618759469	n=24	
	0.035618809823	n=36	
	0.035618823556	n=48	
	0.035618828134	n=60	
	0.035618846	extr.	

Tabelle 4e: π_z=-1 m=0 ν=9

$\nu = 9$ m=0 $\pi = -1$ $(=5f_0')$		
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**	**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
1.000	(0.03612954 n=12)	
	0.036129531609 n=12	
	0.036129740654 n=24	
	0.036129766594 n=36	
	0.036129775749 n=48	
	0.036129778801 n=60	
	0.036129791 extr.	
1.500	(0.03667081 n=12)	
	0.036670805297 n=12	
	0.036670919738 n=24	
	0.036670933471 n=36	
	0.036670938049 n=48	
	0.036670939575 n=60	
	0.036670945 extr.	
2.000	(0.03702699 n=12)	
	0.037026987558 n=12	
	0.037027002326 n=24	
	0.037027073007 n=36	
	0.037027074533 n=48	
	0.037027076059 n=60	
	0.037027082 extr.	
3.000	(0.03748798 n=12)	
	0.037487974896 n=12	
	0.037488019146 n=24	
	0.037488023724 n=36	
	0.037488025250 n=48	
	0.037488026776 n=60	
	0.037488032 extr.	

Tabelle 4e: π_z=-1 m=0 ν=9

$\nu = 11$ m=0 $\pi = -1$ $(=5p_0')$			
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**		**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
0.100	0.023475688818	n=12	
	0.023483804968	n=24	
	0.023485039404	n=36	
	0.023485416296	n=48	
	0.023485570410	n=60	
	0.0234861	extr.	0.0234858572 n_r=84 n_l=84
0.150	(0.033224	n=12)	
	0.023793391872	n=12	
	0.023796728969	n=24	
	0.023797218776	n=36	
	0.023797366786	n=48	
	0.023797426296	n=60	
	0.02379766	extr.	
0.200	(0.0240538	n=12)	
	0.024053791262	n=12	
	0.024055666567	n=24	
	0.024055936648	n=36	
	0.024056017519	n=48	
	0.024056052615	n=60	
	0.02405619	extr.	
0.300	(0.0244364	n=12)	
	0.024436331912	n=12	
	0.024437215396	n=24	
	0.024437338992	n=36	
	0.024437374087	n=48	
	0.024437390872	n=60	
	0.02443745	extr.	
0.500	(0.0249137	n=12)	
	0.024913652143	n=12	
	0.024914019880	n=24	
	0.024914073286	n=36	
	0.024914087019	n=48	
	0.024914094648	n=60	
	0.02491412	extr.	
0.700	(0.02521448	n=12)	
	0.025214462607	n=12	
	0.025214677756	n=24	
	0.025214706748	n=36	
	0.025214714377	n=48	
	0.025214718955	n=60	
	0.025214737	extr.	
1.000	(0.02551650	n=12)	
	0.025516484408	n=12	
	0.025516608005	n=24	
	0.025516624789	n=36	
	0.025516632419	n=48	
	0.025516633945	n=60	
	0.025516640	extr.	

Tabelle 4f: π_z=-1 m=0 ν=11

$\nu = 11$ m=0 $\pi = -1$ $(=5p_0')$		
β	**direkte Integration in der Landau-Basis**	**Diagonalisierung in der sphärischen Basis**
1.500	(0.02583550 n=12)	
	0.025835482607 n=12	
	0.025835551271 n=24	
	0.025835558901 n=36	
	0.025835563479 n=48	
	0.025835565004 n=60	
	0.025835571 extr.	
2.000	(0.02604493 n=12)	
	0.026044914821 n=12	
	0.026044959072 n=24	
	0.026044963649 n=36	
	0.026044968227 n=48	
	0.026044968701 n=60	
	0.026044990 extr.	
3.000	(0.026315406 n=12)	
	0.026315392558 n=12	
	0.026315418498 n=24	
	0.026315420023 n=36	
	0.026315421549 n=48	
	0.026315423075 n=60	
	0.026315429 extr.	

Tabelle 4f: π_Z=-1 m=0 ν=11

Tabelle 5: In dieser Tabelle sind die Werte für positive z-Parität und m=0, und zwar 5g0, 5d0 und 5s0 eingetragen. Der 1. Wert in Klammern bei jedem β-Wert ist wieder der von Rösner berechnete Wert. Hier existieren keine Vergleichsrechnungen in der sphärischen Basis mehr.

direkte Integration in der Landau-Basis m=0 π=+1						
β	ν=12 (=$5g'_0$)		ν=14 (=$5d'_0$)		ν=16 (=$5s'_0$)	
0.300	0.021878487782	n=12	0.016609952201	n=12	0.013036957282	n=12
	0.021932075123	n=24	0.016645677604	n=24	0.013061931342	n=24
	0.021947292713	n=36	0.016655817069	n=36	0.013069015997	n=36
	0.021954017261	n=48	0.016660298575	n=48	0.013072148627	n=48
	0.021957674793	n=60	0.016662735404	n=60	0.013073849982	n=60
	0.021972	extr.	0.016672	extr.	0.013080	extr.
0.500	(0.022016	n=12)	(0.016697	n=12)	(0.013096	n=12)
	0.022015823524	n=12	0.016697043226	n=12	0.013095715859	n=12
	0.022035368507	n=24	0.016709981153	n=24	0.013104713967	n=24
	0.022040661781	n=36	0.016713483045	n=36	0.013107150795	n=36
	0.022042958229	n=48	0.016715001294	n=48	0.013108208229	n=48
	0.022044192665	n=60	0.016715820691	n=60	0.013108777382	n=60
	0.0220491	extr.	0.0167190	extr.	0.0131110	extr.
0.700	(0.022190	n=12)	(0.016811	n=12)	(0.013174	n=12)
	0.022189885058	n=12	0.016810983960	n=12	0.013174370122	n=12
	0.022201287951	n=24	0.016818511121	n=24	0.013179596257	n=24
	0.022204310717	n=36	0.016820505445	n=36	0.013180980229	n=36
	0.022205609240	n=48	0.016821361463	n=48	0.013181573796	n=48
	0.022206303514	n=60	0.016821820752	n=60	0.013181892705	n=60
	0.0222090	extr.	0.0168236	extr.	0.0131831	extr.
1.000	(0.022398	n=12)	(0.016948	n=12)	(0.0132689	n=12)
	0.022398179158	n=12	0.016947598856	n=12	0.013268790342	n=12
	0.022405089864	n=24	0.016952147501	n=24	0.013271941282	n=24
	0.022406888875	n=36	0.016953330057	n=36	0.013272763731	n=36
	0.022407656392	n=48	0.016953835123	n=48	0.013273113157	n=48
	0.022408063802	n=60	0.016954105204	n=60	0.013273300840	n=60
	0.0224096	extr.	0.0169551	extr.	0.0132740	extr.
1.500	(0.0226439	n=12)	(0.0171087	n=12)	(0.0133801	n=12)
	0.022643873704	n=12	0.017108664674	n=12	0.013380059571	n=12
	0.022648034775	n=24	0.017111397524	n=24	0.013381947083	n=24
	0.022649098313	n=36	0.017112097902	n=36	0.013382430787	n=36
	0.022649551499	n=48	0.017112395448	n=48	0.013382636781	n=48
	0.022649791062	n=60	0.017112552614	n=60	0.013382748170	n=60
	0.0226507	extr.	0.0171131	extr.	0.0133831	extr.
2.000	(0.0228176	n=12)	(0.0172224	n=12)	(0.0134586	n=12
	0.022817554635	n=12	0.017222402451	n=12	0.013458557918	n=12
	0.022820540780	n=24	0.017224360153	n=24	0.013459911373	n=24
	0.022821302194	n=36	0.017224859116	n=36	0.013460254695	n=36
	0.022821624154	n=48	0.017225071213	n=48	0.013460402706	n=48
	0.022821793527	n=60	0.017225182602	n=60	0.013460477474	n=60
	0.0228224	extr.	0.01722562	extr.	0.01346077	extr.
3.000	(0.0230566	n=12)	(0.0173788	n=12)	(0.0135664	n=12
	0.023056607349	n=12	0.017378737564	n=12	0.013566349694	n=12
	0.023058543689	n=24	0.017380002518	n=24	0.013567224022	n=24
	0.023059030445	n=36	0.017380324478	n=36	0.013567445275	n=36
	0.023059236666	n=48	0.017380457230	n=48	0.013567538353	n=48
	0.023059345003	n=60	0.017380528946	n=60	0.013567585655	n=60
	0.02305977	extr.	0.01738081	extr.	0.01356777	extr.

Tabelle 5: π_Z=+1 m=0

LITERATURVERZEICHNIS

Angel, J.R.P., Borra, E.P. u. Landstreet, J.D., Astrophys. J. Suppl. 45, 457 (1981)

Avron, J.E., Herbst, I.B., Simon, B., 1978 Ann. Phys., NY **114** 431

Garstang, R.H., Journal de Physique, Coll. C2, Suppl. n°11, 43, 19 (1982)

Herold, H., Ruder, H., Wunner, G.: 1985, Phys. Rev. Lett. 1452

Herold, H., Ruder, H., Wunner, G.: 'The two-body-problem in the precence of a homogeneous magnetic field' J. Phys. B: At. Mol. Phys 14(1981) 751-764

Rösner, W.: 'Das Wasserstoffatom im Magnetfeld zwischen 50T und $5 \cdot 10^8$T', Dissertation Erlangen 1982

Shabad, A.E., Usov, V.V.: 1982, Nature 295, 213

Schmitt, W.: 'Der Photoeffekt beim Wasserstoffatom in exterm starken Magnetfeldern', Diplomarbeit Erlangen 1980

Steitz, A.: 'Stoßionisation und Dreierstoßrekombination am Wasserstoffatom in Magnetfeldern zwischen 23,5 und 470 Megatesla', Diplomarbeit Tübingen 1984

Trümper, J., Pietsch, W., Reppin, C.,Voges, W., Staubert, R., Kendziorra, E., Astrophys. J. Lett. 239, L107 (1978)

Tworz, J.: 'Das Quantenmechanische Zweikörperproblem im starken Magnetfeld', Diplomarbeit Tübingen 1984

Wintgen, D.: 'Das Wasserstoffatom im starken Magnetfeld' Dissertation München 1985

Wunner, G., Rösner, W., Herold, H., Ruder, H., Astron. Astrophys. **149** (1985)

Danksagung

Zum Schluß möchte ich noch Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder für die interessante und aktuelle Aufgabenstellung und die allzeit gewährte Unterstützung danken. Weiter gebührt Dank den Herrn Prof. Dr. Heinz Herold und Prof. Dr. Günter Wunner für ihre ständige Diskussionsbereitschaft und ihre nützlichen Hinweise. Danken möchte ich noch Herrn Thomas Ertl, dessen unermüdlicher Einsatz und dessen Hilfe bei Computerfragen den numerischen Teil der Arbeit sehr erleichterte.

Lebenslauf

Name:	Florian Geyer
geboren:	3. 2. 1957
in:	Heidenheim/Brenz
Eltern:	Heinrich Geyer Ruth Geyer geb. Schmid
Familienstand:	ledig
April 1963 - Juni 1971	Besuch der Grund- und Hauptschule in Bolheim
August 1971 - Juni 1973	Besuch der Gewerblich-Technischen Berufs- und Fachschule in Heidenheim/Brenz Abschluß: mittlere Reife
August 1973 - Mai 1976	Besuch des Technischen Gymnasium in Heidenheim Abschluß: Fachgebundene Hochschulreife
Juli 1976 - September 1977	Ableistung des Grundwehrdienstes beim FKG in Landsberg/Lech
1. 10. 1977	Immatrikulation an der Universität Tübingen im Fach Physik
26. 3. 1980	Vordiplom in Physik
1. 11. 1982 - 31.12. 1983	Anfertigung der Diplomarbeit: "Photoionisation und Photorekombination beim Wasserstoffatom in Magnetfeldern zwischen 23,5 und 470 Megatesla" unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder am Lehrstuhl für Theoretische Astrophysik der Universität Tübingen
18. 1. 1984	Diplom in Physik

1. 1. 1985 - 31. 8. 1985	Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Theoretische Astrophysik
1. 9. 1985 - 28. 2. 1987	Stipendiat der Landesgraduiertenförderung
Februar 1984 - Februar 1987	Anfertigung der Dissertation "Berechnung der Photoionisation des Positroniums in Pulsarmagnetosphären und von Wasserstoffenergiewerten in Weißen-Zwerg-Magnetfeldern" unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Hanns Ruder am Lehrstuhl für Theoretische Astrophysik der Universität Tübingen

Vorlesungen, Seminare und Praktika habe ich bei folgenden Professoren und Dozenten besucht:

Baumann, Dähn, Dittrich, Ebert, Fäßler, Gaukler, Gönnenwein, Herold, Hübener, Kasper, Kaul, Krüger, Lutz, Mack, Mertens, Pfister, Ruder, Schief, Schwenk, Sohr, Speidel, Strähle, Stumpf, Wolff, Wunner

Druck Köhler Tübingen